

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ՏԵՇԿԱԳԻՐ Ի ՀԵՏԻ ՏԵՇԿԱԳԻՐ Ի ՀԵՏԻ

ՖԻԶԻԿԱ

ՀԱՏՈՂ ՏՈՄ

60

№ 4

ՀՀ ԳԱԱ "ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ" ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ

ИЗДАТЕЛЬСТВО "ГИТУТЮН" НАН РА

ԵՐԵՎԱՆ ԵՐԵՎԱՆ

2025

Журнал издается с 1966 г.
Выходит 4 раза в год
на русском и английском языках

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Карен М. Гамбaryan, главный редактор
Арам В. Папоян, зам главного редактора
Нателла Р. Агамалян, ответственный секретарь

А.А. Ахумян, Э.М. Казарян, Р.Б. Костанян, Х.В. Неркараян, Е.Ш. Мамасахлисов,
А.О. Меликян, А.Г. Мкртчян, Д.Г. Саркисян, А.А. Саркисян, А.А. Саарян, Г. Пихлер
(Хорватия), С.Г. Казарян (Великобритания), Д.В. Рощупкин (Россия), М. Аузинш
(Латвия), Д. Будкер (Германия, США), Т.А. Вартанян (Россия)

ԽՄԲԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈԼԵԳԻԱ

Կարեն Մ. Ղամբարյան, գլխավոր խմբագիր
Արամ Վ. Պապոյան, գլխավոր խմբագրի տեղակալ
Նատելլա Ռ. Աղամալյան, պատասխանատու քարտուղար

Ա.Ա. Հախումյան, Է.Մ. Ղազարյան, Ռ.Բ. Կոստանյան, Խ.Վ. Ներկարարյան,
Ե.Շ. Մամասախլիսով, Ա.Օ. Մելիքյան, Ա.Հ. Մկրտչյան, Ա.Հ. Սարգսյան, Դ.Հ. Սարգսյան,
Հ.Ա. Սարգսյան, Ա.Ա. Սահարյան, Գ. Պիխլեր (Խորվատիա), Ս.Գ. Կազարյան (Մակարդական Բրիտանիա),
Դ.Վ. Ռոշչուպկին (Ռուսաստան), Մ. Այզինշ (Լատվիա),
Դ. Բուդկեր (Գերմանիա, ԱՄՆ), Տ.Ա. Վարդանյան (ԱՄՆ)

EDITORIAL BOARD

Karen M. Gambarian, editor-in-chief
Aram V. Papoyan, associate editor
Natella R. Aghamalyan, executive secretary

A.A. Hakhumyan, E.M. Ghazaryan, R.B. Kostanyan, K.V. Nerkararyan,
E.Sh. Mamasakhlisov. A.H. Melikyan, A.H. Mkrtychyan, D.H. Sarkisyan,
H.A. Sarkisyan, A.A. Saharyan, G. Pichler (Croatia), S.G. Kazarian (UK),
D.V. Roschupkin (Russia), M. Auzinsh (Latvia), D. Budker (Germany, USA),
T.A. Vartanyan (Russia)

Адрес редакции: Республика Армения, 0019
Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24-г.

Խմբագրության հասցեն՝ Հայաստանի Հանրապետություն,
0019, Երևան, Մարշալ Բագրամյան պող., 24-գ:

Editorial address: 24-g, Marshal Baghramyan Ave.,
Yerevan, 0019, Republic of Armenia.

e-mail: izvestiya-fizika@sci.am

Известия НАН Армении, Физика, т.60, №4, с.463–469 (2025)

УДК 539.172.12

DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.4-463

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА АКТИВНОСТИ МЕДИЦИНСКОГО ИЗОТОПА ГАЛЛИЙ-68, ПОЛУЧАЕМОГО ПОСРЕДСТВОМ РЕАКЦИИ $^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$

А.А. ГРИГОРЯН*

Национальная научная лаборатория им. А.И. Алиханяна, Ереван, Армения

*e-mail: arminegrig@yerphi.am

(Поступила в редакцию 29 октября 2025 г.)

Проведена теоретическая оценка активности медицинского радиоизотопа ^{68}Ga при циклотронном облучении цинковых мишней по реакции $^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$. С помощью SRIM/TRIM определены потери энергии протонов в материале мишени и зависимость энергии от глубины (толщины) мишени. С помощью программы TALYS 1.9 получены эффективные сечения $\sigma(E)$ для реакции $^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$. Установлено, что оптимальный диапазон энергий протонного пучка (12.5–4.6 МэВ) обеспечивает высокий теоретический выход продукта и минимизирует побочные реакции. Для облучения природного и обогащённого цинка рассчитанные значения теоретического выхода составили соответственно 0.82 и 4.36 ГБк/(мкАч), которые согласуются с литературными данными. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации технических параметров производства ^{68}Ga для медицинских применений.

1. Введение

Радиофармацевтические препараты на основе ^{68}Ga вызывают значительный интерес в связи с расширением их клинического применения в области позитронно-эмиссионной томографии (ПЭТ) [1]. Изотоп ^{68}Ga преимущественно распадается с испусканием позитронов (89%), а оставшиеся 11% распадаются посредством электронного захвата. Период полураспада $T_{1/2} = 67.71$ мин, продукт распада — стабильный ^{68}Zn . Эти свойства делают ^{68}Ga удобным для применения в ПЭТ-диагностике [2].

На протяжении нескольких десятилетий основным источником ^{68}Ga оставались генераторы $^{68}\text{Ge}/^{68}\text{Ga}$ [3], в которых материнский радионуклид ^{68}Ge с длительным периодом полураспада ($T_{1/2} = 270$ дней) обеспечивает стабильные поставки ^{68}Ga в клиники. Однако, несмотря на широкое использование, генераторы ограничены в активности и зависят от поставок ^{68}Ge , что снижает их практическость.

Альтернативным подходом является циклотронное облучение обогащённого ^{68}Zn по реакции $^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$ [4, 5]. Облучение может проводиться с использованием жидких [4] или твердых мишней [1, 5]. Жидкие мишени облегчают перенос материала из циклотронного модуля в химические установки для выделения ^{68}Ga , однако их использование ограничивает выход изотопной активности из-за малого числа атомов цинка в растворе. Для увеличения выхода активности

целесообразно использовать твердые мишени.

В Национальной научной лаборатории им. Алиханяна (ННЛА) отдел Исследований и Производства Изотопов более десяти лет занимается разработкой технологий получения радиоизотопов с использованием твердотельных мишений [6, 7].

Целью настоящего исследования является теоретическая оценка активности ^{68}Ga при циклотронном облучении твёрдых мишений из природного и обогащённого ^{68}Zn . Для этого применяется метод Монте-Карло (TRIM/SRIM) [8] для анализа зависимости энергии протонов от толщины мишени, а также расчёт эффективных сечений ядерной реакции с помощью программы TALYS 1.9 [9]. Результаты работы направлены на оптимизацию параметров облучения и повышение эффективности производства ^{68}Ga для медицинских целей.

2. Метод расчётов

При облучении мишени для получения радионуклида необходимо учитывать ряд параметров, которые в математической форме позволяют количественно оценить выход продукта при заданных условиях. Поэтому в экспериментальных исследованиях значительную роль играют теоретические расчёты. Рассмотрим эти параметры более подробно.

Активность радионуклида, образующегося при облучении материала мишени заряженными частицами в циклотроне (или нейtronами в ядерном реакторе) определяется выражением

$$A = IN\sigma(1 - e^{-\lambda t}), \quad (1)$$

где A — активность произведенного радионуклида (Бк), ($1 \text{ Бк} = 1 \text{ распад/с}$), I — поток облучающих частиц (частицы $\times \text{см}^{-2} \text{с}^{-1}$), N — число атомов мишени, σ — сечение образования радионуклида (см^2), ($1 \text{ барн} = 10^{-24} \text{ см}^2$), λ — постоянная распада ($\lambda = \ln 2 / T_{1/2} (\text{с}^{-1})$), t — время облучения (с).

Множитель $(1 - e^{-\lambda t})$ называется коэффициентом насыщения; он стремится к единице при $t \approx 5-6 T_{1/2}$. В этот момент устанавливается стационарное состояние: скорость образования радионуклида равна скорости его распада, и активность достигает максимального значения [10].

3. Расчёты и результаты

Сечение ядерных реакций можно определить экспериментальными методами или рассчитать при помощи программных пакетов, симулирующих ядерные реакции. В данной работе сечение ядерной реакции $^{68}\text{Zn}(p,n)^{68}\text{Ga}$ рассчитано с помощью программы TALYS 1.9 для энергий до 18 МэВ.

При использовании мишени из природного цинка необходимо учитывать её изотопный состав, чтобы учесть возможные конкурирующие реакции в рассматриваемом диапазоне энергий. Изотопный состав природного цинка и протон-индуцированные реакции представлены в табл.1.

Поскольку сечение σ является функцией энергии, для получения значения σ первоначально была рассчитана энергия протонного пучка после прохождения очень тонких слоев мишени ($\Delta x = 20 \text{ мкм}$). Это было сделано с помощью программы SRIM/TRIM. В результате симуляции была получена зависимость энергий падающих протонов от толщины цинковой мишени. Поскольку при таких

Табл.1. Протон-индукционные реакции на природном цинке и образующиеся изотопы

Изотоп цинка	Природное содержание, %	Ядерная реакция	Порог реакции, кэВ	Образованный изотоп	Период полураспада, $T_{1/2}$
^{64}Zn	48.63	(p,n)	8078.9	^{64}Ga	2.63 мин
^{64}Zn	48.63	(p, α)	0	^{61}Cu	3.33 ч
^{64}Zn	48.63	(p,pn)	12048.9	^{63}Zn	38.47 мин
^{66}Zn	27.9	(p,2n)	15326.1	^{65}Ga	15.2 мин
^{66}Zn	27.9	(p,pn)	8968.8	^{65}Zn	244.26 дн
^{66}Zn	27.9	(p, α)	0	^{63}Cu	Стабильный
^{66}Zn	27.9	(p,n)	6048.9		
^{67}Zn	4.1	(p,2n)	13206.2	^{66}Ga	9.49 ч
^{67}Zn	4.1	(p, α)	0	^{64}Cu	12.7 ч
^{67}Zn	4.1	(p,pn)	4900.6	^{66}Zn	Стабильный
^{67}Zn	4.1	(p,n)	1810.4		
^{68}Zn	18.75	(p,2n)	12159.4	^{67}Ga	78 ч
^{68}Zn	18.75	(p,pn)	8091.8	^{67}Zn	Стабильный
^{68}Zn	18.75	(p, α)	0	^{65}Cu	Стабильный
^{68}Zn	18.75	(p,n)	3758.4	^{68}Ga	67.71 мин
^{70}Zn	0.62	(p,2n)	9221.6	^{69}Ga	Стабильный
^{70}Zn	0.62	(p,pn)	9351	^{69}Zn	56.4 мин
^{70}Zn	0.62	(p,n)	1457.7	^{70}Ga	21.14 мин

малых толщинах энергия изменяется незначительно, зависимость сечений от энергии $\sigma(E)$ можно считать постоянной в пределах каждого слоя. На рис.1а показана зависимость энергии падающих протонов от толщины цинковых слоев с шагом 20 мкм, начиная с 17.6 МэВ.

Обычно в экспериментах по производству медицинских изотопов в НИЛА используется циклотрон С18 с энергией пучка 18 МэВ, расположенный в Центре производства радиоизотопов в Ереване. Перед мишенью в мишенном модуле устанавливается титановое окно толщиной 50 мкм, которое снижает энергию

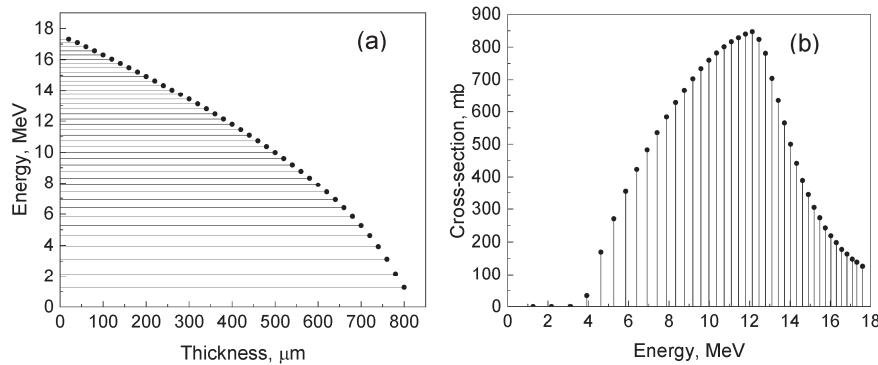


Рис.1. Зависимости (а) энергии протонов от толщины цинковой мишени и (б) сечения $^{68}\text{Zn}(p,n)^{68}\text{Ga}$ реакции от энергии протонов.

пучка до 17.6 МэВ, поэтому в симуляциях расчеты начинаются с этой энергии.

Используя полученные значения энергий для каждого 20 мкм слоя (рис.1а), с помощью программы TALYS 1.9 были рассчитаны сечения реакции $^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$ для соответствующих энергий (рис.1б). Дополнительно была рассмотрена сопутствующая реакция $^{68}\text{Zn}(\text{p},2\text{n})^{67}\text{Ga}$ в данном диапазоне энергий. На рис.2 представлена зависимость сечений этих реакций от энергии падающих протонов.

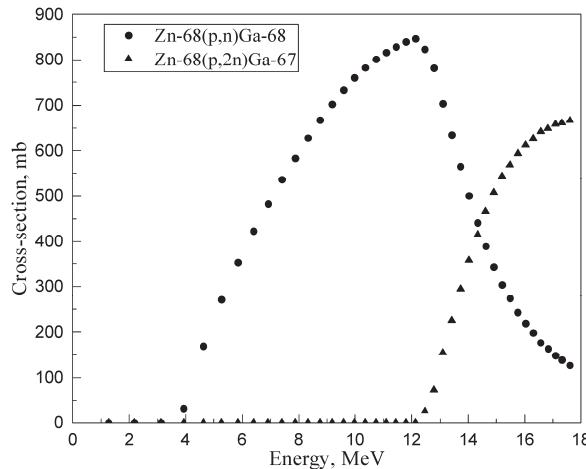


Рис.2. Зависимость сечения реакций $^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$ и $^{68}\text{Zn}(\text{p},2\text{n})^{67}\text{Ga}$ от энергии протонов

Из графика можно определить оптимальный диапазон энергий для реакции $^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$ — 4.6–12.5 МэВ. В этом диапазоне энергий удается минимизировать образование сопутствующего радиоизотопа ^{67}Ga ($T_{1/2} = 78$ ч) по реакции (p,2n).

Следующим шагом при расчете активности по формуле (1) является определение числа атомов мишени ^{68}Zn . Количество атомов мишени N рассчитывается из массы m мишленного материала, его атомной массы M , естественного содержания K изотопа в мишени, а также числа Авогадро ($N_A = 6.02 \times 10^{23}$) по формуле:

$$N = \frac{m}{M} K N_A. \quad (2)$$

Масса m мишленного материала определялась с учетом того, что радиус диска-мишени, используемой в экспериментах, равен $r = 6$ мм. Таким образом, для числа атомов мишени толщиной 20 мкм получаем:

$$N = 2.78 \times 10^{19}.$$

Интенсивность I облучающих частиц может быть измерена различными физическими методами. На практике ее значение предоставляет оператором циклотрона и может быть преобразовано в количество частиц на единицу площади в единицу времени ($\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$) [10]. Например, при интенсивности пучка $I = 1$ мкА количество частиц, попадающих в мишень в единицу времени на единицу площади (при радиусе пучка $r = 6$ мм), составит:

$$I = 5.53 \times 10^{12} \text{ частиц}/(\text{см}^2\text{с}).$$

В выбранном диапазоне энергий 12.5–4.6 МэВ для цинковых слоев нашей

мишени ($r = 6$ мм) толщина и масса соответственно составляют 340 мкм и 270 мг.

С учетом продолжительности облучения $t = 1$ ч, подставив все полученные значения в формулу (1) и суммируя по сечению $\sigma(E)$, получим

$$A = \sum_i A_i = \sum_i [IN\sigma_i(1 - e^{-\lambda t})], \quad (3)$$

$$A = IN(1 - e^{-\lambda t}) \sum_i \sigma_i, \quad (4)$$

активность $A = 0.82$ ГБк.

Это означает, что при облучении мишени из натурального цинка толщиной 340 мкм в течение 1 ч при токе пучка 1 мкА и начальной энергии 12.5 МэВ выход ^{68}Ga составит 0.82 ГБк/(мкАч). Масштабируя расчет с учетом содержания ^{68}Zn в природном цинке (18.75%), для гипотетической мишени из 100% обогащенного ^{68}Zn при тех же параметрах расчетный выход составит примерно 4.36 ГБк/(мкАч).

Табл.2. Расчетные выходы активности ^{68}Ga при облучении мишени в течение 1 мкАч

Тип мишени	Содержание ^{68}Zn , %	Расчетная активность, ГБк/(мкАч)
Природный Zn	18.75	0.82
Обогащённый ^{68}Zn	100	4.36

Результаты проведенных расчетов сопоставлены с экспериментальными данными других авторов, полученными при различных параметрах пучка, но с начальной энергией, близкой к 12.5 МэВ. Ниже представлена таблица выходов ^{68}Ga , полученных несколькими исследователями при облучении твёрдых мишеней из обогащённого ^{68}Zn протонным пучком с энергией, максимально близкой к выбранной нами, при различных интенсивностях и длительностях облучения. Все значения приведены в одинаковых единицах — ГБк/(мкАчмг).

4. Заключение

Выполненные расчёты позволили оценить оптимальные условия получения изотопа ^{68}Ga при циклотронном облучении цинковых мишеней. Определённый диапазон энергий (12.5–4.6 МэВ) обеспечивает высокий теоретический выход ^{68}Ga и минимизирует сопутствующие реакции в обогащенном ^{68}Zn . Для природного и обогащенного цинка были получены теоретические выходы 0.82 и 4.36 ГБк/(мкАч), соответственно. Экспериментальные значения удельных активностей (табл.3), приведенные в различных публикациях, показывают, что при энергии пучка, близкой к 12.5 МэВ, выход ^{68}Ga варьируется в диапазоне 0.008–0.022 ГБк/(мкАчмг) (удельная активность на единицу массы), что хорошо соглашается с полученным нами значением — 0.016 ГБк/(мкАчмг).

Проведенное исследование может служить основой для оптимизации технологических параметров и повышения эффективности производства медицинского радионуклида ^{68}Ga .

Автор благодарит руководителя отдела Исследований и Производства изотопов Р.К. Даллакяна за поддержку и конструктивные обсуждения в процессе работы.

Табл.3. Выход для ^{68}Ga в нескольких статьях при энергии пучка, близкой к 12.5 МэВ, при различных параметрах облучения

Энергия пучка, МэВ	Интенсивность, мкА	Время облучения, мин	Масса ^{68}Zn , мг	Активность ^{68}Ga (ЕОВ), ГБк	Удельная активность ^{68}Ga , ГБк/(мкАч)	Удельная активность на единицу массы, ГБк/(мкАчмг)	Публикация
12.6	25	68	140	31 ± 1	1.09	0.008	[5]
12.8	20	15	Не указана	16.7	3.34	–	[11]
12.5	30	20	100	13.8 ± 1.4	1.38	0.013	[12]
12.5	30	73	100	37.5 ± 1.9	1.03	0.0103	[12]
13	80	10	147	39	2.93	0.0199	[13]
13	80	15	115	51	2.55	0.022	[13]
13	80	20	150	79	2.96	0.0197	[13]
13	80	25	220	123	3.69	0.0168	[13]
13	80	102	204	352	2.59	0.0127	[13]
13	80	102	223	370	2.72	0.012	[13]
13	80	102	221	365	2.68	0.012	[13]
13	80	120	263	385	2.41	0.009	[13]
13	80	120	300	>370	2.31	0.008	[14]
12.5	1	60	270	4.36	4.36	0.016	Наши данные

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке МОНКС РА в рамках научного проекта 24LCG-2G028 и проекта Международного Агентства по Атомной Энергии IAEA Coordinated Research Project F22073 "Production of cyclotron-based Gallium-68 radioisotope and related radiopharmaceuticals" – "Development of Gallium-68 Radioisotope at AANL (YerPhi) under C18 Proton Beam of Armenian Cyclotron".

ЛИТЕРАТУРА

1. **M.A. Synowiecki, L.R. Perk, J.F.W. Nijesen.** EJNMMI Radiopharmacy and Chemistry, **3**, 3 (2018).
2. International Atomic Energy Agency. Gallium-68 Cyclotron Production, Vienna, 2019.
3. **I. Velikyan.** Molecules, **20**, 12913 (2015).
4. **F. Alves, V.H.P. Alves, S.J.C. Do Carmo, A.C.B. Neves, M. Silva, A.J. Abrunhosa.** Modern Physics Letters A, **32**, 1740013 (2017).
5. **J. Siikanen, E. Jussing, S. Milton, C. Steiger, J. Ulin, C. Jonsson, E. Samen, T.A Tran.** Applied Radiation and Isotopes, **176**, 109825 (2021).
6. **A. Avetisyan, R. Dallakyan, R. Sargsyan, A. Melkonyan, M. Mkrtchyan, G. Harutyunyan, N. Dobrovolsky.** IJESIT, **4**, 37 (2015).

7. **A. Avetisyan, R. Dallakyan, N. Dobrovolski, A. Manukyan, A. Melkonyan, I. Sinenko.** arXiv preprint, arXiv:2010.06970 (2020).
8. **J.F. Ziegler, M.D. Ziegler, J.P. Biersack.** SRIM - The Stopping and Range of Ions in Matter, 2009.
9. **A. Koning, S. Hilaire, S. Goriely.** TALYS 1.9. A nuclear reaction program, 2017.
10. **G.B. Saha.** Fundamentals of Nuclear Pharmacy. Springer Cham, 2018.
11. **S. Zeisler, A. Limoges, J. Kumlin, J. Siikanen, C. Hoehr.** Instruments, **3**, 10 (2019).
12. **B.J. Nelson, J. Wilson, S. Richter, M.J.M. Duke, M. Wuest, F. Wuest.** Nuclear Medicine and Biology, **80**, 24 (2020).
13. **J. Svedjehed, M. Parnaste, K. Gagnon.** Nuclear Medicine and Biology, **104**, 1 (2022).
14. **H. Thisgaard, J. Kumlin, N. Langkjær, J. Chua, B. Hook, M. Jensen, J.H. Dam.** EJNMMI Radiopharmacy and Chemistry, **6**, 1 (2021).

$^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$ ՈԵԱԿՑԻԱՅՈՎ ԱՐՏԱԴՐՎՈՂ ԳԱԼԻՈՒՄ-68 ԲԺՇԿԱԿԱՆ
ԻԶՈՏՈՊԻ ԱԿՏԻՎՈՒԹՅԱՆ ՏԵՍԱԿԱՆ ԳՆԱՀԱՏՄԱԿԱՆ

Ա.Ա. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ

Կատարվել է բժշկական ռադիոիզոտոպ ^{68}Ga -ի ակտիվության տեսական գնահատում՝ $^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$ ռեակցիայի միջոցով ցինկի թիրախների ցիկլոտրոնային ճառագայթման արդյունքում: SRIM/TRIM ծրագրի միջոցով որոշվել են թիրախում պրոտոնների էներգիայի կորուստները և էներգիայի կախումը թիրախի խորությունից (հաստությունից): TALYS 1.9 ծրագրի միջոցով հաշվարկվել են $\sigma(E)$ էֆեկտիվ կտրվածքները: Սահմանվել է, որ պրոտոնների էներգիայի օպտիմալ էներգետիկ միջակայքը (12.5–4.6 MeV) ապահովում է բարձր տեսական ելք և նվազեցնում է կողմնակի ռեակցիաները: Բնական և հարստացված ցինկի թիրախների ճառագայթման դեպքում տեսական հաշվարկված ելքերը կազմել են համապատասխանաբար 0.82 և 4.36 GBq/(\mu Ah), որոնք համապատասխանում են հրապարակված տվյալներին: Ատացված արդյունքները կարող են օգտագործվել բժշկական կիրառությունների նպատակով ^{68}Ga -ի արտադրության տեխնիկական պարամետրերի օպտիմալացման համար:

THEORETICAL ESTIMATION OF THE ACTIVITY OF THE MEDICAL ISOTOPE GALLIUM-68 PRODUCED BY THE REACTION $^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$

A.A. GRIGORYAN

A theoretical evaluation of the activity of the medical radioisotope ^{68}Ga produced by cyclotron irradiation of zinc targets via the $^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$ reaction has been performed. Using SRIM/TRIM, proton energy losses in the target material and the dependence of proton energy on target depth (thickness) were determined. Effective cross-sections $\sigma(E)$ for the $^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$ reaction were obtained using the TALYS 1.9 code. It was established that the optimal proton energy range (12.5–4.6 MeV) provides a high theoretical product yield while minimizing side reactions. For irradiation of natural and enriched zinc targets, the calculated theoretical yields were 0.82 and 4.36 GBq/(\mu Ah), respectively, which agree with literature data. The results obtained can be used to optimize the technical parameters for the production of ^{68}Ga for medical applications.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ГРАФИТОВОЕ ПОКРЫТИЕ АЛЮМИНИЕВОЙ ФОЛЬГИ

Р.Н. БАЛАСАНЯН, Г.Р. БАДАЛЯН, И.Г. ГРИГОРЬЯН*,
П.Г. МУЖИКЯН, Р.Б. КОСТАНЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: irina.g.grigoryan@gmail.com

(Поступила в редакцию 1 октября г.)

Экспериментально исследовано влияние электрического поля на графитовое покрытие алюминиевой фольги. Эксперименты выполнены в электролизере с электролитом из обычной воды. В качестве катода и анода использовались образцы из алюминиевой фольги с графитовым покрытием. Испытание электродов осуществлялось под действием электрических импульсов с крутыми фронтами. При определённых параметрах воздействия электрического поля с выдержкой в течение 72 часов наблюдалось изменение целостности покрытия катода. На поверхности анода не были обнаружены изменения покрытия. При помощи сканирующего электронного микроскопа, оборудованного системой энергодисперсионного рентгеновского микроанализа, проводился анализ химического состава поверхности катода до и после воздействия на электролизер электрическими импульсами. В результате воздействия электрического поля зарегистрировано значительное разрушение структуры графитового покрытия алюминиевой фольги. Приводится возможный физический механизм преобразования углерода на графитовом покрытии алюминиевой фольги при приложении к нему отрицательного полюса электрического поля.

1. Введение

Алюминий и его сплавы широко используются в авиационных, машиностроительных и многих электротехнических устройствах благодаря некоторым физико-техническим свойствам. Однако возможности их применения несколько ограничиваются тем, что в некоторых средах алюминий подвергается коррозии [1]. В частности, затруднено использование алюминия для изготовления суперконденсаторов, так как они разрушаются в щелочных электролитах. Поэтому с целью защиты от коррозии на алюминиевые конструкции наносят покрытия на основе углерода. Такие покрытия используются благодаря химической инертности и высокой плотности изделий из графита [2]. На алюминиевые конструкции наносят достаточно тонкие, толщиной менее 1 мкм, защитные углеродные покрытия. Применительно к алюминию такие покрытия создавались, в основном, для его защиты от коррозии в водных растворах солей [3, 4]. В работе [5] приведены результаты исследования устойчивости к коррозии защитных покрытий из графита на изделия из алюминия, которые подверглись воздействию 30 вес% водного раствора NaOH, при $pH=15$. Проводились исследования зависимости защитных свойств покрытий от способа их нанесения, подготовки поверхности подложки и наличия промежуточных слоев.

Важным применением графитовых покрытий является создание литий-ионных (Li-ion) батарей, которые применяются как для электропитания портативной электроники, так и для питания электромобилей. В качестве токопровода положительного электрода используется алюминиевая пластина с графитовым покрытием. Широкое распространение литий-ионных батарей основано на том, что они обеспечивают высокую плотность энергии, длительный срок службы и относительно низкую скорость саморазряда. Очевидно, что литий-ионные батареи и суперконденсаторы должны эксплуатироваться под действием электрических полей. Учитывая то, что алюминиевые изделия, покрытые тонкой графитовой пленкой, также находятся под действием электрических полей, возникла задача испытания устойчивости графитовых покрытий к воздействию внешнего электрического поля.

Данная работа посвящена исследованию влияния электрических полей на устойчивость графитовых покрытий на алюминиевой фольге.

2. Условия эксперимента

Экспериментальная установка представляла собой электролизёр с электродами из алюминиевой фольги с защитными покрытиями из графита. В качестве электролита использовалась обычная вода. Известно, что графитовые покрытия устойчивы к воздействию воды, в чём убедились при выдержке алюминиевой фольги в контакте с водой в течение десяти дней. Для испытания устойчивости графитовых покрытий к воздействию электрического поля в электролизёре на электродах из алюминиевой фольги с защитными графитовыми покрытиями воздействовали электрическими импульсами длительностью 8 мкс и амплитудой 10 В. После выдержки в течение трёх дней на поверхности катода появились изменения однородности графитового покрытия. Для определения химического состава изменённых участков проводились исследования новых образований с помощью сканирующего электронного микроскопа VEGA TS 5130MM, оборудованного системой энергодисперсионного рентгеновского микроанализа INCA Energy 300.

3. Результаты исследований и их обсуждение

Известно, что углерод самый распространенный элемент на Земле и образует многочисленные связи, в основном, с водородом и кислородом. В природе элементарный углерод имеет три изотопа. Наиболее распространенным является углерод ^{12}C , менее встречающийся ^{13}C и радиоактивный изотоп ^{14}C . Возникновение радионуклида углерода представляется как результат ядерных преобразований в верхних слоях атмосферы. В стратосфере и тропосфере происходит поглощение атомами азота-14 (^{14}N) тепловых нейтронов, которые являются результатом взаимодействия космических лучей с веществами разреженной атмосферы.

Канал образования радионуклида углерода представляется следующим образом: $^{14}\text{N}(\text{n},\text{p})^{14}\text{C}$, где n – тепловой нейтрон, p – протон. Далее изотоп углерода ^{14}C самопроизвольно распадается по каналу β^- -распада и образуется нерадиоактивный азот ^{14}N , электрон (β^-) и электронное антинейтрино ($\bar{\nu}$) по следующей схеме:



Период полураспада радиоизотопа ^{14}C составляет 5730 лет [6], и скорость распада не зависит от химических и физических свойств окружения.

Проводилось исследование структуры графитового покрытия на образце алюминиевой фольги до проведения эксперимента. На рис.1 представлены картины поверхности данного образца алюминиевой фольги с графитовым покрытием (а) и выделенные участки для определения химических составов указанных областей (б).

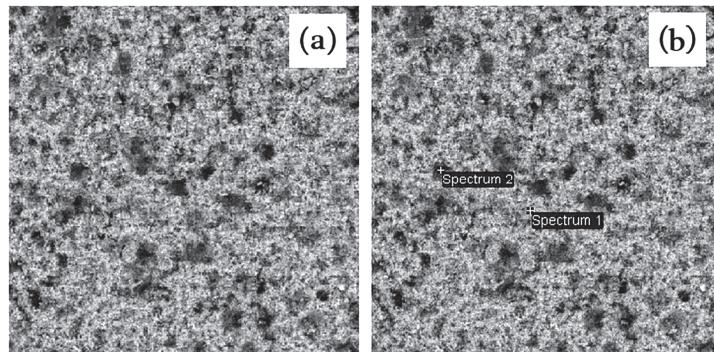


Рис.1. Картина поверхности алюминиевой фольги с графитовым покрытием (а) и выделенные на ней участки для определения химического состава (б).

Из рисунков следует, что поверхность фольги весьма неоднородна. На относительно светлом фоне имеются весьма тёмные участки. Для определения различий в химическом составе этих участков были измерены их характеристические рентгеновские спектры, представлены на рис.2. На спектре 1 представлен характеристический спектр общего фона, а на спектре 2 представлен характеристический спектр тёмных участков изображения фольги. Очевидно, что при хорошей электропроводимости исследуемого участка с подложкой электроны проходят через участок без отражения, а при плохой проводимости наблюдается некоторое рассеяние электронов, что приводит к повышению освещенности данного

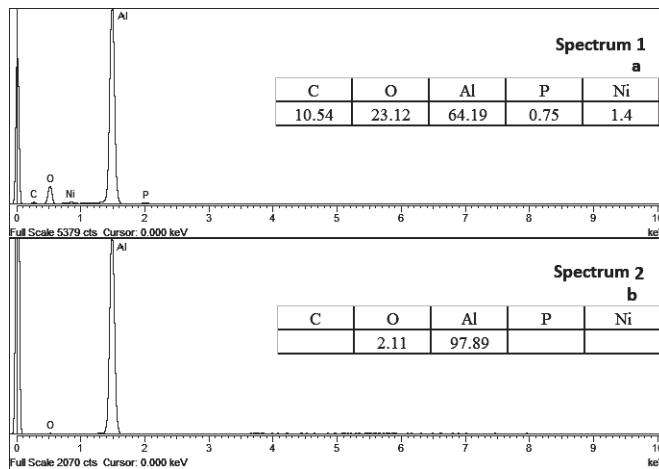


Рис.2. Характеристические рентгеновские спектры выделенных участков поверхности алюминиевой фольги с графитовым покрытием.

участка. С учётом указанных условий можно предположить, что на тёмном участке отсутствует вещество с хорошей электропроводностью или, возможно, этот участок покрыт весьма тонким слоем графита. На рис. 2 представлено также содержание химических элементов на участках Spectrum 1 и Spectrum 2.

Из рис.1 следует, что участок «spectrum 2», который имеет тёмный цвет, в основном состоит из алюминия с концентрацией 97.89 вес%. На более светлом участке «spectrum 1» зарегистрировано наличие углерода с концентрацией 10.54 вес%. Следовательно, результаты измерений химического состава графитового покрытия алюминиевой фольги свидетельствуют о неоднородности исследуемых покрытий. Для исследования устойчивости графитовых покрытий к воздействию электрического поля использовался электролизёр с электродами из алюминиевой фольги с нанесёнными защитными графитовыми покрытиями. Питание электролизёра осуществлялось электрическими импульсами длительностью 8 мкс и амплитудой 10 В. После выдержки в течение трёх дней на поверхности катода обнаружилось изменение графитового покрытия.

На рис.3 представлены изображения электродов из алюминия с графитовыми покрытиями после воздействия на электролизёр электрическими импульсами в течение 72 час. В качестве электролита использовалась обычная вода. Из рисунка следует, что на поверхности анода (А) не обнаружены изменения, а на поверхности катода (К) появились разрушения.

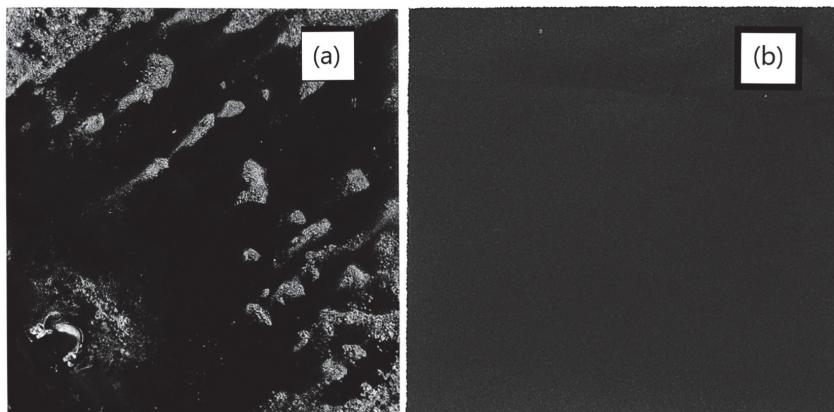


Рис.3. Вид электродов из алюминиевой фольги с графитовыми покрытиями после включения питания электролизёра прямоугольными электрическими импульсами в течение 72 часов: (а) – катод, (б) – анод.

В процессе эксперимента под действием электрического поля наблюдалось образование газовых пузырей вблизи катода. При использовании алюминиевых электродов без графитовых покрытий у катода также образуются пузыри. Однако состав пузырей отличались от результатов исследований, выполненных при алюминиевых электродах с покрытиями. В случае электрода из алюминия без покрытия, при поднесении огня к пузырькам, возникали микровзрывы газов. Указанное явление связано с образованием водорода, возникающего у катода в процессе электролиза, основанном на диссоциированных ионах водорода в воде. Суть описанного явления в том, что при контакте металла с водой возникают двойные электрические слои, состоящие из отрицательного слоя на металлической

поверхности и вблизи него положительно заряженного слоя, состоящего из диссоциированных ионов водорода (H^+). При приложении электрического поля к металлическим электродам электролизёра от катода могут оторваться электроны и под действием силы кулоновского притяжения двигаться к диссоциированным ионам водорода. Если энергия электрона достигнет величины стационарного уровня атома водорода (13.6 эВ), то создаются условия для образования атомов водорода ($e^- + H^+ \rightarrow H$) [7], следовательно, и образование пузырьков из водорода вблизи катода. По данным экспериментальных наблюдений, при катоде из алюминиевой фольги с графитовым покрытием, возникшие пузырьки при контакте с огнём не лопались. Сделано предположение, что при графитовых покрытиях у катода за счёт β^- распада радиоуглерода по каналу (1) образуется газ из стабильного изотопа азота, который не реагирует на огонь. В приведённых условиях эксперимента возможно также повышение концентрации радиоуглерода. Если энергия электрона, достигшего диссоциированного водорода меньше энергии стационарного уровня атома водорода, то его захватит ион водорода, в результате чего образуется квазинейтрон. Для компенсации дефекта массы квазинейтрон войдёт в ядро находящегося вблизи атома. Учитывая геометрическую близость катода с углеродной поверхностью к месту образования квазинейтрона, можно предположить возможность образования новых изотопов углерода по следующим каналам:



Следовательно, процесс преобразования стабильных изотопов углерода в радиоуглерод в соответствии с (2) и распад радиоуглерода в азот по каналу (1) могут привести к нарушению целостности углеродной поверхности катода. Поэтому для выявления образования новых химических элементов проводилось исследование разрушенных участков поверхности катода на сканирующем электронном микроскопе VEGA TS 5130MM, оборудованном системой энергодисперсионного рентгеновского микроанализа INCA Energy 300.

На рис.4 представлены полученные на электронном микроскопе части изменившейся области поверхности катода (а) и выбор участков (б) для определения химического состава измененных участков плёнки графитового покрытия, приведённого на рис.3.

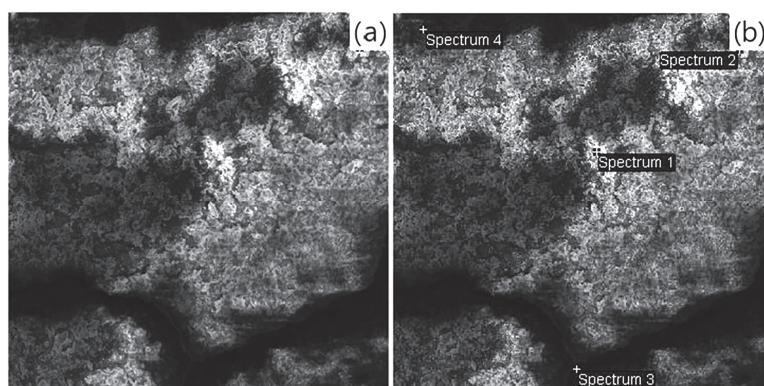


Рис.4. Картина части освещённой области катода (см. рис.3), полученная на электронном микроскопе (а), и выбор участков для определения изменений химического состава плёнки графита (б).

Как было отмечено, на картинках электронного микроскопа светлые участки соответствуют менее разрушенным областям графитового покрытия, а тёмные участки — разрушенным областям. Поэтому из рис.4 следует, что картина разрушенных участков графитового покрытия, полученная на электронном микроскопе, показывает значительные повреждения поверхности после воздействия электрического поля. Эти неоднородности отразились на результатах измерений концентрации образованных химических элементов, представленных в табл.1.

Из данных табл.1 следует, что на тёмных участках рис.4 (Spectrum 1, Spectrum 3 и Spectrum 4) отсутствует графит и регистрируется значительное количество алюминия. На светлом участке (Spectrum 2) зарегистрирован углерод и соответственно элементы алюминия относительно меньшей концентрации.

Табл.1. Результаты квазиколичественных измерений концентрации химических элементов в вес% на повреждённом участке поверхности катода после электролиза

Номер спектра	C	O	Mg	Al	Si	Ca	Общий
Spectrum 1		52.29	12.72	28.23	2.27	4.50	100.00
Spectrum 2	5.06	63.68	10.43	17.27	2.32	1.23	100.00
Spectrum 3		18.28		81.13		0.59	100.00
Spectrum 4		58.27	6.08	30.73	2.60	2.32	100.00

4. Заключение

Экспериментально исследовано влияние электрического поля на графитовое покрытие алюминиевой фольги. Эксперименты выполнены в электролизере с электролитом из обычной воды. В качестве электродов использовались образцы из алюминиевой фольги с графитовым покрытием. Под действием электрических импульсов с крутыми фронтами испытывались графитовые покрытия электродов. Показано, что поверхность анода не подверглась разрушению, но на поверхности катода образовались значительные повреждения. Изменения структуры графитового покрытия катода подтверждены измерениями химического состава поверхности катода сканирующим электронным микроскопом, оборудованным системой энергодисперсионного рентгеновского микроанализа. Приводится возможный физический механизм преобразования углерода на катоде из алюминиевой фольги с графитовым покрытием при приложении к нему электрического поля.

ЛИТЕРАТУРА

1. N.L. Glinka, General Chemistry. Moscow, Integral-Press, 2004.
2. S. Neuville, A. Matthews. Thin Solid Films, **515**, 6619 (2007).
3. O. Lensch, K. Volz, M. Kiuchi, W. Ensinger. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B, **175**, 575 (2001).
4. C. Srividya, S. Babu. Chemistry of Materials, **8**, 2528 (1996).

5. **M.S. Zibrov, A.A. Pisarev, G.V. Khodachenko, D.V. Mozgrin.** Uspekhi Prikladnoi Fiziki [Advances in Applied Physics], **1**, 167 (2013).
6. **F. Kondev, M. Wang, W. Huang, S. Naimi, G. Audi.** Chinese Physics C, **45**, 030001 (2021).
7. **R.N. Balasanyan, R.B. Kostanyan.** Phys. J., **2**, 45 (2016).

ԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ ԴԱՇՏԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ ԱԼՅՈՒՄԻՆԵ ԹԻԹԵՂԻ ԳՐԱՖԻՑԱՅԻ ԾԱԾԿՈՒՅԹԻ ՎՐԱ

Ռ.Ն. ԲԱԼԱՍԱՆՅԱՆ, Գ.Ռ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ, Ի.Գ. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ,
Պ.Հ. ՄՈՒՇԻԿՅԱՆ, Ռ.Բ. ԿՈՏԱՆՅԱՆ

Փորձարարականորեն հետազոտվել է այումինե թիթեղին նստեցված գրաֆիտե ծածկույթի էլեկտրական դաշտի ազդեցությունը: Փորձերը իրականացվել են էլեկտրոլիզերով՝ սովորական ջրից բաղկացած էլեկտրոլիտով: Գրաֆիտե ծածկույթով այսումինե թիթեղների նմուշները ծառայել են որպես կաթոդ և անոդ: Էլեկտրոդները փորձարկվել են կտրուկ ճակատով էլեկտրական իմպուլսների ազդեցության տակ: Էլեկտրական դաշտի ազդեցությամբ 72 ժամ պահելուց հետո դիտարկվել է կաթոդի ծածկույթի ամբողջականության փոփոխություններ: Անոդի մակերեսային ծածկույթի փոփոխություններ չեն հայտնաբերվել: Սկանավորող էլեկտրոնային մանրադիտակի միջոցով, որը համարված է էներգիայի դիսպերսիոն ռենտգենյան միկրովերլուծության համակարգով, իրականացվել է կաթոդի մակերեսի ծածկի քիմիական կազմը էլեկտրոլիզորին էլեկտրական իմպուլսներով ազդելուց առաջ և հետո: Էլեկտրական դաշտի ազդեցության արդյունքում գրանցվել է այումինե թիթեղի գրաֆիտային ծածկույթի կառուցվածքի զգալի քայլայում: Ներկայացվում է այսումինե թիթեղի գրաֆիտային ծածկի վրա ածխածնի փոխակերպման հնարավոր ֆիզիկական մեխանիզմը, եթե դրա վրա կիրավում է բացասական դաշտ:

**EFFECT OF ELECTRIC FIELDS ON GRAPHITE
COATINGS OF ALUMINUM FOIL**

R.N. BALASANYAN, G.R. BADALYAN, I.G. GRIGORYAN,
P.H. MUZHICKYAN, R.B. KOSTANYAN

The effect of an electric field on a graphite coating deposited on an aluminum plate was studied experimentally. The experiments were carried out under electrolysis conditions, with an electrolyte composed of ordinary water. Samples of aluminum plates with graphite coatings served as cathode and anode. The electrodes were tested under the influence of electric pulses with a sharp front. After exposure to the electric field for 72 hours, changes in the integrity of the cathode coating were observed. No changes were detected on the surface coating of the anode. Using a scanning electron microscope equipped with an energy-dispersive X-ray microanalysis system, the chemical composition of the cathode surface coating was analyzed before and after the action of electric pulses on the electrolyzer. As a result of the electric field exposure, significant degradation of the structure of the graphite coating on the aluminum plate was recorded. A possible physical mechanism of carbon transformation on the graphite coating of the aluminum plate under the application of a negative electric field is presented.

Известия НАН Армении, Физика, т.60, №4, с.477–485 (2025)

УДК 535.14, 004.942

DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.4-477

АВТОМАТИЧЕСКАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ ЛАЗЕРНЫХ ПОЛЕЙ ДЛЯ МАНИПУЛИРОВАНИЯ КВАНТОВЫМИ СОСТОЯНИЯМИ

Р. СААКЯН¹, Р. САРГСЯН¹, Э. ПОГОСЯН², К. АРЗУМАНЯН^{1,3},
А. АМБАРЦУМЯН^{1,3*}, Э.А. ГАЗАЗЯН^{3,4}

¹Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

²Университет Сириус, Краснодарский край, Российская Федерация

³Институт проблем информатики и автоматизации НАН Армении, Ереван, Армения

⁴Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: hasmik.hambardzumyan@iiap.sci.am

(Поступила в редакцию 9 декабря 2025 г.)

В данной работе предлагается численный подход к задаче обратного квантового управления с акцентом на автоматизированное формирование внешних лазерных управляющих полей, обеспечивающих высокоточный и контролируемый перенос населённостей в многоуровневых квантовых системах. Метод основан на оптимизации параметров управляющих импульсов с использованием градиентных алгоритмов в сочетании с автоматическим дифференцированием, что позволяет эффективно управлять физическими характеристиками лазерных полей и повышать устойчивость процесса переноса. Полученные результаты создают основу для разработки более общих методов квантового управления, ориентированных на экспериментальную реализацию на реальных физических платформах.

1. Введение

Контролируемый перенос населённостей между квантовыми состояниями является одной из фундаментальных задач атомной, молекулярной и квантово-оптической физики. Одним из наиболее эффективных подходов для достижения этой цели является метод стимулированного адиабатического перехода Рамана (STIRAP), которое реализует адиабатическое управление посредством специально подобранных лазерных импульсов, что приводит к полному переносу населённостей между начальным и конечным состояниями. Первоначально введенный для изучения динамики химических реакций, STIRAP превратился в широко используемый метод управления во многих квантовых системах [1]. В обзоре [2] представлено всестороннее теоретическое и экспериментальное описание метода STIRAP и его многочисленных расширений. Авторы представляют систематический анализ различных конфигураций связи, объясняют ключевые принципы, лежащие в основе адиабатического переноса населённостей, и рассматривают широкий спектр экспериментальных реализаций. Особое внимание уделяется устойчивости метода к умеренным колебаниям контрольных параметров, а также его ограничениям в неадиабатических и диссипативных условиях.

В работе [3] показано интуитивное понимание его геометрической структуры и динамического поведения. Это изложение в стиле учебника оказывается

особенно ценным для визуализации адиабатических состояний и для проектирования управляющих импульсов, основанных на логике навигации по темным состояниям. Развивая эту концепцию, автор работы [4] разработал теоретическую модель полного переноса населенности в пятиуровневой системе М-типа, основанную на линейном сканировании частоты лазерного поля вблизи резонансных условий каждого перехода. Этот метод позволяет осуществлять последовательное и когерентное возбуждение переходов между уровнями и демонстрирует высокую эффективность в управлении динамикой многоуровневых квантовых систем. Сравнительный анализ с традиционными схемами STIRAP показал, что подход, основанный на сканировании, предлагает заметные преимущества как с точки зрения точности управления, так и численной стабильности. В совокупности эти исследования подчеркивают значительный потенциал стратегий с частотным управлением в области когерентного управления сложными квантовыми архитектурами. В работе [5] представлен аналитический метод обратного проектирования импульсов, который позволяет получить заданную динамику населенности в нелинейной Л-системе с потерями на промежуточном уровне. Этот подход позволяет минимизировать каналы потерь, что имеет критическое значение для приложений, чувствительных к декогеренции. С точки зрения практического применения, в работах [6,7] показывается полезность использования метода STIRAP в квантовой обработке информации, где обратимость и надежность имеют первостепенное значение. В статье [8] расширили сферу применения STIRAP, продемонстрировав как можно реализовать квантовые вентили.

В настоящей работе мы разрабатываем численный подход к задаче обратного квантового управления, уделяя особое внимание автоматизированному проектированию внешних лазерных управляющих полей, которые обеспечивают высокоточный и контролируемый перенос в многоуровневых квантовых системах. Этот метод основан на оптимизации параметров управляющих импульсов с использованием градиентных алгоритмов в сочетании с автоматическим дифференцированием, что позволяет эффективно управлять физическими свойствами управляющих полей.

В следующих разделах мы приводим подробную математическую формулировку, описываем архитектуру стратегии оптимизации и представляем численные результаты, демонстрирующие эффективность и универсальность нашего подхода. Результаты этой работы закладывают основу для более общих протоколов квантового управления, направленных на экспериментальную реализацию на реальных физических платформах.

2. Основы физических процессов

Рассмотрим пятиуровневую квантовую систему, организованную в так называемой конфигурации М-системы (рис.1), состоящую из трех основных состояний $|1\rangle$, $|3\rangle$, и $|5\rangle$ и двух возбужденных состояний $|2\rangle$ и $|4\rangle$.

Временная эволюция матрицы плотности системы [9] $\rho \in \mathcal{C}^{5 \times 5}$ определяется основным уравнением Линдблада, которое учитывает как когерентные, так и некогерентные процессы:

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H(t), \rho] + \mathcal{L}[\rho]. \quad (1)$$

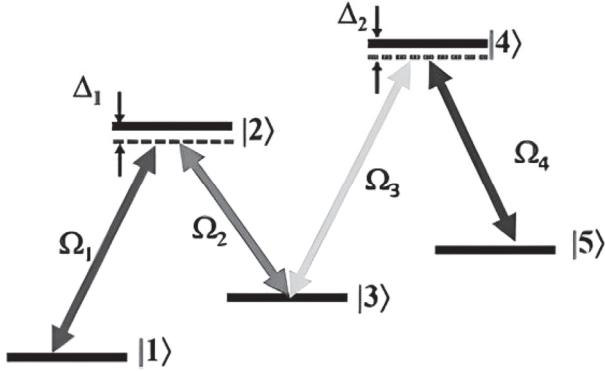


Рис.1. Схематическое представление пятиуровневой квантовой системы М-системы с четырьмя лазерными переходами.

Здесь $H(t)$ — матрица Гамильтона М-системы (2), а $\mathcal{L}[\rho]$ — супероператор Линдблада, описывающий диссипацию:

$$H(t) = \begin{pmatrix} 0 & \Omega_1(t)e^{-i\Delta_1 t} & 0 & 0 & 0 \\ \Omega_1(t)e^{i\Delta_1 t} & 0 & \Omega_2(t)e^{i\Delta_2 t} & 0 & 0 \\ 0 & \Omega_2(t)e^{i\Delta_2 t} & 0 & \Omega_3(t)e^{-i\Delta_3 t} & 0 \\ 0 & 0 & \Omega_3(t)e^{i\Delta_3 t} & 0 & \Omega_4(t)e^{i\Delta_4 t} \\ 0 & 0 & 0 & \Omega_4(t)e^{-i\Delta_4 t} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $\Omega_j(t)$ — зависимая от времени частота Раби, соответствующая переходу $|j\rangle \leftrightarrow |j+1\rangle$, характеризующая силу взаимодействия между атомным диполем и внешним электромагнитным полем.

Зависимость от времени $\Omega_j(t)$ обычно реализуется с помощью лазерных импульсов гауссовой формы:

$$\Omega_j(t) = \Omega_{0,j} \exp\left(-\frac{(t-t_{0,j})^2}{\sigma_j^2}\right), \quad (3)$$

где $\Omega_{0,j}$ — пиковая частота Раби, $t_{0,j}$ — центр импульса во времени, а σ_j обозначает временную ширину.

Диссипация описывается супероператором Линдблада (4):

$$\mathcal{L}[\rho] = \sum_k \gamma_k \left(L_k \rho L_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_k^\dagger L_k, \rho \} \right), \quad (4)$$

где L_k — операторы коллапса, а γ_k — соответствующие им скорости распада. Для М-системы мы рассматриваем каналы распада, перечисленные в (5):

$$L_1 = |1\rangle\langle 2|, \quad L_2 = |3\rangle\langle 2|, \quad L_3 = |3\rangle\langle 4|, \quad L_4 = |5\rangle\langle 4|. \quad (5)$$

Процессы распада характеризуются двумя различными скоростями. Величина Γ обозначает естественную (продольную) скорость распада возбужденных состояний. Поперечная скорость распада γ определяет дефазирование когерентности и включает в себя как спонтанное излучение, так и дополнительное однородное расширение, как указано в уравнении (6):

$$\gamma = \frac{\Gamma}{2} + \gamma_c, \quad (6)$$

где γ_c — феноменологический параметр, учитывающий дефазирование при столкновениях или другие воздействия окружающей среды.

3. Математическая формулировка и оценка параметров

В этом разделе мы описываем численные методы, используемые для оценки параметров системы (1). Мы используем стандартные подходы решения обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) [10] в сочетании с автоматическим дифференцированием и градиентными методами для минимизации настраиваемой функции потерь [11–13].

Рассмотрим задачу Коши с неизвестным параметром $p \in R^m$:

$$\dot{\rho} = M(\rho(t), t, p), \quad \rho(0) = \rho_0, \quad t \in [0, T]. \quad (7)$$

Определим функцию потерь $\mathcal{L}[\rho]$, которая измеряет расхождение между симулированными траекториями и желаемым поведением:

$$\mathcal{L}(\rho) = \int_0^T \rho_{11}(t) dt + \sum_{k=2}^4 \left[\int_0^T \rho_{kk}(t) dt \right] + [\rho_{55}(T) - 1]^2. \quad (8)$$

Первый член ограничивает накопление населения в начальном состоянии $|1\rangle$ во второй половине отрезка времени, препятствуя преждевременному переноса. Второй член ограничивает населения в промежуточных состояниях $|2\rangle, |3\rangle$ и $|4\rangle$ на протяжении всего отрезка времени. Последний член обеспечивает полное накопление населения в конечном состоянии $|5\rangle$.

В адиабатических протоколах типа STIRAP решающую роль играет не только форма, но и *очерёдность* включения управляющих полей. Перестановка импульсов часто приводит к возбуждению нежелательных промежуточных уровней и снижению устойчивости протокола. При численной оптимизации без дополнительных ограничений алгоритм может находить формально приемлемые решения с «неправильным» порядком импульсов, которые трудно реализовать экспериментально. Чтобы мягко зафиксировать желаемую последовательность во времени, мы добавляем в функцию потерь дифференцируемый штраф за нарушение порядка. Пусть $t = (t_1, t_2, t_3, t_4)$ — вектор временных центров четырёх импульсов. Для каждой пары (a, b) , для которой мы хотим требовать неравенство $t_a > t_b$ (импульс a приходит позже импульса b), вводим гладкий «индикатор» на основе логистической функции

$$\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}. \quad (9)$$

Тогда для заданной крутизны перехода $k_{\text{sharp}} > 0$ определяем

$$P_{ab} = \sigma(k_{\text{sharp}}(t_a - t_b)). \quad (10)$$

При $t_a \gg t_b$ аргумент сигмоиды положителен и велик, $P_{ab}(t) \approx 1$; если же порядок сильно нарушен, $t_a \ll t_b$, то $P_{ab}(t) \approx 0$. За счёт гладкости $\sigma(x)$ этот индикатор остаётся дифференцируемым по t_a и t_b для любых значений параметров.

Общий шаблон желаемого порядка зададим в виде множества упорядоченных пар

$$C = \{(a_r, b_r)\}_{r=1}^R,$$

каждый элемент которого соответствует требованию $t_{a_r} > t_{b_r}$. Тогда «мягкий» индикатор всего паттерна определяется произведением

$$P_{\text{ord}}(t) = \prod_{(a,b) \in C} P_{ab}(t). \quad (11)$$

При больших k_{sharp} величина $P_{\text{ord}}(t)$ близка к 1, если все неравенства из C хорошо выполняются, и экспоненциально мала, если хотя бы одно из них грубо

нарушено.

В рассматриваемых расчётах мы используем порядок

$$t_4 > t_2 > t_3 > t_1,$$

который соответствует множеству $C = \{(4, 2), (2, 3), (3, 1)\}$ и даёт

$$P_{\text{ord}}(t) = \sigma(k_{\text{sharp}}(t_4 - t_2)) \sigma(k_{\text{sharp}}(t_2 - t_3)) \sigma(k_{\text{sharp}}(t_3 - t_1)). \quad (12)$$

Обратите внимание, что каждая сигмоидальная функция $c_r \in [1, 2]$ приближается к единице, когда соответствующее неравенство хорошо выполняется, и стремится к нулю при его нарушении. Поэтому произведение $c_1 c_2 c_3$ является гладкой оценкой того, что все требуемые сравнения импульсов одновременно выполнены. В частности, $P_{ab}(t) \approx 1$ означает корректную последовательность импульсов, тогда как $P_{ab}(t) \ll 1$ указывает на существенное нарушение хотя бы одного условия.

Чтобы превратить этот индикатор во вклад в функцию потерь, используем

$$L_{\text{ord}}(t) = \lambda[1 - P_{\text{ord}}(t)], \quad (13)$$

где $\lambda > 0$ задаёт вес ограничения по сравнению с основными условиями переноса населённости. При таком выборе штраф обращается в ноль, когда желаемый порядок выполнен $P_{\text{ord}}(t) \approx 1$, и становится значительным, если порядок нарушен ($P_{\text{ord}}(t) \ll 1$). Таким образом, оптимизатор поощряет решения с корректной временной последовательностью импульсов, не вводя жёстких недифференцируемых ограничений и сохраняя полную дифференцируемость по всем параметрам.

4. Результаты

В данной модели игнорируются эффекты, связанные с движением атомов, включая как тепловое поступательное движение, так и возможные доплеровские сдвиги, которые могут повлиять на условия резонанса взаимодействия с лазерными импульсами. Принимая во внимание чисто радиационное затухание, скорость чистого дефазирования принимается равной $\gamma = \Gamma/2$, так что населенность возбужденных состояний релаксирует к значениям устойчивого состояния. Во всех симуляциях мы используем безразмерную формулировку, нормированную к естественной скорости затухания возбужденных состояний. Выбрано физическое значение $\Gamma = 5\text{MHz}$. Соответственно время измеряется в единицах $1/\Gamma = 0.2 \mu\text{s}$, а все параметры, связанные с частотой, включая частоты Раби, детонации и скорости дефазирования, выражаются в единицах Γ .

Параметры, использованные для численного моделирования, представлены в табл.1 и соответствуют четырем каналам взаимодействия в квантовой системе. Каждый канал характеризуется четырьмя ключевыми величинами лазерного поля: временем пика импульса t_0 , его шириной σ_0 , амплитудой частоты Раби Ω_0 и расстройки Δ . «Числовые значения приведены в табл. 1–3.

Эти параметры были получены путем численной оптимизации и обеспечивают эффективный перенос населенности в М-системе. Они минимизируют переходное заселение промежуточных возбужденных состояний, сохраняя при этом необходимые условия адиабатичности.

На рис.2 представлена эволюция М-системы, где управление переходами осуществляется с помощью зависимых от времени гауссовых лазерных

Табл.1. Оптимизированные параметры импульса для протокола управления, показанного на рис.2d. Каждый импульс определяется его временным центром t_0 , шириной σ_0 , амплитудой Ω_0 и детонацией Δ . Параметры были получены с помощью ограниченной оптимизации для обеспечения адиабатического и эффективного переноса популяции в многоуровневой квантовой системе

#	$t_0, 1/\Gamma$	$\sigma_0, 1/\Gamma$	Ω_0, Γ	Δ, Γ
1	18.9032811	3.227598027	3.552287843	-0.208536178
2	14.95405537	4.942187821	28.22099145	4.953080222
3	20.94907939	5.234351941	33.03312243	0.061713435
4	16.89870222	3.616342008	3.472354099	-5.125913793

импульсов (3), параметры которых (Ω_0, t_0, σ) оптимизируются численно с помощью методов, основанных на градиенте, поддерживающих автоматическое дифференцирование.

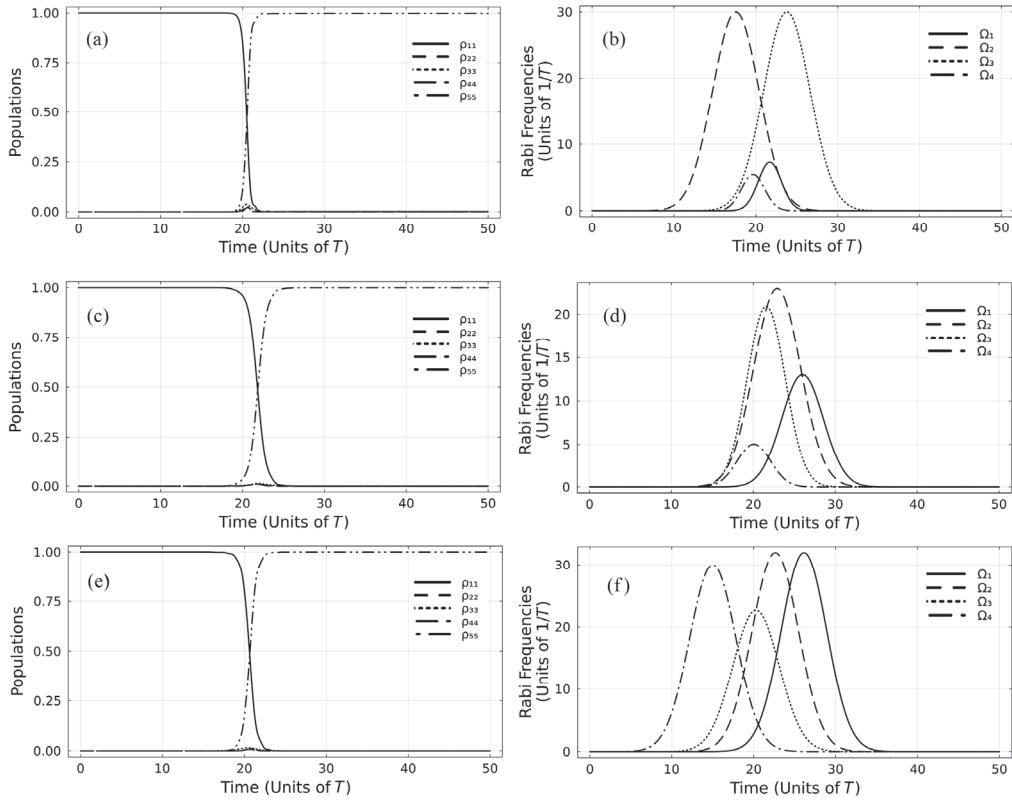


Рис.2. Временная эволюция оптимизированной М-системы с населённостями $\rho_{ii}(t)$ ($i = 1, \dots, 5$) и соответствующими частотами Раби $\Omega_i(t)$ ($i = 1, \dots, 4$). Т — длительность импульса.

Табл.2. Параметры импульса, соответствующие рис.2e

#	$t_0, 1/\Gamma$	$\sigma_0, 1/\Gamma$	Ω_0, Γ	Δ, Γ
1	26.13033743	3.940057889	32.000000000	0.101091573
2	22.63505033	4.000000000	32.000000000	0.000448309
3	20.28044792	4.000000000	22.68347007	-0.004890434
4	15.000000000	4.000000000	30.000000000	-0.003750851

Верхние панели графиков отображают диагональные элементы матрицы плотности от $\rho_{11}(t)$ до $\rho_{55}(t)$, представляющие временную эволюцию вероятности нахождения системы в каждом соответствующем состоянии. Начальное условие таково, что вся населенность находится в основном состоянии $|1\rangle$. По мере продвижения последовательности импульсов уменьшается населенность состояния $|1\rangle$, и населенность переносится в состояние $|5\rangle$. Поведение возбужденных состояний $|2\rangle$ и $|4\rangle$ является особенно критическим, поскольку они подвержены диссипации посредством спонтанного распада. Графики показывают, что ρ_{22} и ρ_{44} остаются близки к нулю, посредством квантовой интерференции — ключевого механизма STIRAP. Промежуточное состояние $|3\rangle$ может временно заполняться, но его заполнение также подавляется в процессе оптимизации импульса. В конечный момент времени $\rho_{55}(t)$ достигает значения, близкого к единице, что означает почти полный перенос в состояние $|5\rangle$, которое является основным показателем эффективности оптимизации.

Табл.3. Параметры импульса, соответствующие рис.2f

#	$t_0, 1/\Gamma$	$\sigma_0, 1/\Gamma$	Ω_0, Γ	Δ, Γ
1	26.13033743	3.940057889	32.000000000	0.101091573
2	22.63505033	4.000000000	32.000000000	0.000448309
3	20.28044792	4.000000000	22.68347007	-0.004890434
4	15.000000000	4.000000000	30.000000000	-0.003750851

Каждая пара графиков соответствует отдельному этапу численного эксперимента, а именно: начальной конфигурации, промежуточным этапам оптимизации и окончательному оптимизированному результату. Во всех случаях четко видна характерная динамика: формирование импульса, точное перемещение населенности и эффективное подавление промежуточных состояний. Эти графики представляют собой прямую численную интеграцию системы ОДУ, включающую как зависимый от времени гамильтониан, так и диссипативные процессы, смоделированные с помощью супероператора Линдблада. Реализация такого численного протокола требует высокой точности как в решении ОДУ, так и в оптимизации параметров.

5. Заключение

Мы представляем численную оптимационную структуру для улучшения переноса населенности в многоуровневых квантовых системах. Этот подход

оказывается особенно эффективным для реализации стимулированного адиабатического перехода Рамана (STIRAP) в пятиуровневых системах М-типа, который служит фундаментальным протоколом для когерентного управления квантовым состоянием.

Данные эксперименты демонстрируют, что предложенная стратегия является высоко гибкой и надежной. Она позволяет осуществлять высокоточный перенос населенности из исходного состояния в целевое, сводя к минимуму промежуточные уровни и генерируя экспериментально осуществимые управляющие импульсы. Приведенные примеры отражают лишь часть динамических сценариев, достижимых с помощью этого подхода. Методология широко применима к целому ряду задач квантового управления, включая ускоренные адиабатические протоколы, запись квантовой памяти и проектирование квантовых вентиляй.

Работа была поддержанна Комитетом по высшему образованию и науке РА (проект №1–6/IPR). Мы выражаем благодарность Армянскому национальному суперкомпьютерному центру (ANSCC) [14,15] за предоставление необходимых ресурсов и поддержку, благодаря которым стало возможным проведение данного исследования.

ЛИТЕРАТУРА

1. **K. Bergmann, N.V. Vitanov, B.W. Shore.** *J. Chem. Phys.*, **142**, 170901 (2015).
2. **N.V. Vitanov, A.A. Rangelov, B.W. Shore, K. Bergmann.** *Rev. Modern Physics*, **89**, 015006 (2017).
3. **B.W. Shore.** *Adv. Opt. Photon.*, **9**, 563 (2017).
4. **A.Yu. Aleksanyan.** *J. Contemp. Phys.*, **56**, 6 (2021).
5. **A. Ishkhanyan.** *Photonics*, **11**, 1007 (2024).
6. **E. Gazazyan, et al.** *J. Contemp. Phys.*, **47**, 216 (2012).
7. **E.A. Gazazyan, G.G. Grigoryan, D.N. Khachatryan.** *J. Contemp. Phys.*, **53**, 293 (2018).
8. **A.Y. Aleksanyan, E.A. Gazazyan.** *J. Contemp. Phys.*, **53**, 205 (2018).
9. **K. Blum.** *Density Matrix Theory and Applications*. New York: Plenum Press, 1996.
10. **J.C. Butcher.** *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. Hoboken, NJ, USA: Wiley, 2008.
11. **V.K. Dixit**, Ch. Rackauckas. Optimization.jl: A Unified Optimization Package, Zenodo, 2023 – ui.adsabs.harvard.edu/doi.org/10.5281/zenodo.7738525.
12. **C. Zhu, R.H. Byrd, P. Lu, J. Nocedal.** *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, **23**(4), 550 (1997).
13. **D.C. Liu, J. Nocedal.** *Mathematical Programming*, **45**, 503 (1989).
14. Armenian National Supercomputing Center. Armenian National Supercomputing Center (ANSCC), 2025, <https://anscc.sci.am/>.
15. **A. Mirzoyan, V. Sahakyan, Yu. Shoukourian, H.V. Astsatryan.** *Phys. Particles and Nuclei*, **56**, 1291 (2025).

**ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿԱՆԵՐԻ ԿԱՌԱՎԱՐՄԱՆ ՀԱՄԱՐ ՀԱԶԵՐԱՅԻՆ
ԴԱՇՏԵՐԻ ԱՎՏՈՍԱՏՎԱԾՎԱԾ ՕՊՏԻՄԱԼԱՑՈՒՄ**

Ո. ՍԱՀԱԿՅԱՆ, Ո. ՍԱՐԳՍՅԱՆ, Է. ՊՈՂՈՍՅԱՆ, Կ. ԱՐՋՈՒՄԱՆՅԱՆ,
Հ. ՀԱՄԲԱՐՁՈՒՄՅԱՆ, Է. ԳԱԶԱԶՅԱՆ

Բարձր չափողականությամբ պարամետրական տարածությունների հետ աշխատելիս բարձր ճշգրտությունն ու մասշտաբելիությունն ապահովելու համար կիրառվում է գրադիենտային օպտիմալացման մոտեցում՝ համակցված ավտոմատ դիֆերենցելու հետ: Թվային մոդելավորումները հաստատում են առաջարկված մեթոդի արդյունավետությունը. բնակեցվածությունը հուսալիորեն տեղափոխում է թիրախային վիճակի՝ միջամկյալ մակարդակների բնակեցումը նվազագույնի հասցնելով, և այդ գործընթացում կառավարման իմպուլսները մնում են ֆիզիկապես իրագործելի: Մշակված կառուցվածքը ծառայում է որպես ունիվերսալ և փորձարարական կիրառման համար հարմար գործիք՝ քվանտային համակարգերում կառավարման իմպուլսների ավտոմատացված նախագծման համար: Այն հատկապես կարևոր է այն դեպքերում, երբ անալիտիկ մեթոդները կամ պարամետրերի ձեռքով ընտրությունը, օրինակ՝ STIRAP-ի նման ստանդարտ սխեմաներում, դառնում են ոչ արդյունավետ կամ ոչ կիրառելի:

**AUTOMATED OPTIMIZATION OF LASER FIELDS FOR
QUANTUM STATE MANIPULATION**

R. SAHAKYAN, R. SARGSYAN, E. POGOSYAN, K. ARZUMANIAN,
H. HAMBARDZUMYAN, E. GAZAZYAN

This paper proposes a numerical approach to the problem of inverse quantum control with a focus on the automated formation of external laser control fields that ensure high-precision and controlled population transfer in multilevel quantum systems. The method is based on optimizing the parameters of control pulses using gradient algorithms in combination with automatic differentiation, which allows for effective control of the physical characteristics of laser fields and increases the stability of the transfer process. The obtained results provide a foundation for the development of more general quantum control methods focused on experimental implementation on real physical platforms.

Известия НАН Армении, Физика, т.60, №4, с.486–495 (2025)

УДК 532.783

DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.4-486

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ХОЛЕСТЕРИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ С ГОМЕОТРОПНЫМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

Л.С. АСЛАНЯН, Р.Б. АЛАВЕРДЯН*, А.А. МАКАРЯН, Р.С. АКОПЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: ralaverdyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 10 сентября 2025 г.)

Исследованы оптические свойства холестерической структуры с гомеотропными граничными условиями методами компьютерного моделирования волнового уравнения в квазизотропном приближении геометрической оптики. Получена трансляционно инвариантная конфигурация при толщине больше критической, а также для толщин, меньших критических, путём приложения дестабилизирующего электрического поля. При больших величинах шага спирали зависимость эллиптичности выходящего излучения от шага спирали не монотонна и достигает своего максимума в области шага спирали 40 мкм. Показано, что при некоторых дискретных значениях максимального угла отклонения молекул относительно плоскости стенок ячейки вращение плоскости поляризации падающего линейно-поляризованного света не зависит ни от угла поляризации падающего света, ни от длины волны света, по крайней мере, в видимом диапазоне.

1. Введение

Обсуждения деформации спиральной структуры холестерических жидкокристаллов (ХЖК) начались очень давно и до сих пор остаются в центре внимания многих исследователей [1–5]. В слоях, перпендикулярных оси спирали, ХЖК обладают структурой нематических жидкокристаллов (НЖК), т.е. удлиненные молекулы стремятся ориентироваться вдоль преимущественного направления, единичный вектор \mathbf{n} которого называется директором. В холестерических структурах директор поворачивается при переходе из слоя в слой, и такая ячейка функционирует как одномерная периодическая спиральная структура [6–8]. Период ХЖК структуры равен половине шага спирали p . Шаг спирали определяется как расстояние, необходимое для поворота директора на угол 2π . В большинстве случаев величина шага ХЖК порядка длины световой волны, но в смесях НЖК с небольшим количеством ХЖК можно получить смеси с большим шагом. Задавая гомеотропные граничные условия на стенах ячейки, можно получить весьма интересные структурные превращения. Такая структура впервые исследована в [9]. Управлять деформацией такой структуры можно двумя параметрами – толщиной ячейки L , точнее, соотношением L/p и приложенным напряжением [10–12]. Как и ожидается, при нулевых полях в плоских ячейках малой толщины ($L < L_{th}$) молекулы остаются перпендикулярными относительно стенок ячейки. Критическая толщина ячейки, при которой появляются искажения, определяется упругими

константами Франка K_2 и K_3 посредством соотношения $L_{th} = pK_3/2K_2$ [13]. При больших толщинах или при полях, вызывающих неустойчивость структуры, первоначально наблюдается трансляционно инвариантная конфигурация (ТИК). В этом случае направление директора зависит только от расстояния от стенок ячейки (ось z). Неустойчивость однородно гомеотропной структуры также может быть достигнута гидродинамическим потоком, перпендикулярным к невозмущенному директору [14]. При больших толщинах или полях наблюдаются: конфигурация двойного вращения, когда поле директора меняется в плоскости перпендикулярной стеклянным пластинам (x, z), а далее – квадратная решетка, которая модулирована по x , y и z [15–22]. Вблизи этих критических толщин должно наблюдаться резкое уменьшение порога светового эффекта Фредерикса [23]. Важным применением такой структуры является жидкокристаллический сейсмометр, основанный на интерференционных кольцах Ньютона в анизотропных средах [24]. Оптические свойства трех указанных структур исследованы в работе [25]. В частности, показано, что структуры ТИК способны вращать поляризацию света, и рассчитана величина угла поворота. Расчетные значения хорошо согласуются с экспериментом. Показано, что ТИК структуры обладают чисто вращательной мощностью, исключительно при дискретных значениях напряжения.

Целью настоящей работы является исследование особенностей распространения линейно-поляризованной световой волны в ЖЖК с гомеотропными граничными условиями при толщинах, меньших критической, в присутствии дестабилизирующего внешнего электрического поля. Численное решение задачи проводится с помощью системы связанных уравнений, полученных из волнового уравнения, в квазизотропном приближении геометрической оптики.

2. Анизотропия диэлектрической проницаемости и численные параметры холестерика

Пусть имеем холестерик с гомеотропными граничными условиями. Как известно, при малых толщинах ($L < L_{th}$) ЖК структура является однородно гомеотропной [13]. При больших толщинах или в присутствии внешних полей гомеотропная структура возмущается. Распределение директора в таком случае представлено на рис.1.

Проанализируем оптические свойства такой спиральной структуры в режиме адиабатического слежения, т.е. в случае медленного вращения директора вдоль продольной координаты z . Примером такой среды является смесь НЖК и ХЖК в ТИК. В такой фазе для сохранения устойчивости структуры можно

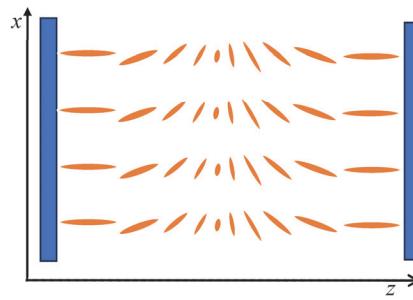


Рис.1. ХЖК с гомеотропными граничными условиями.

применить стабилизирующее магнитное поле. В таких структурах распределение директора вдоль продольной координаты является линейной функцией. В результате среда становится неоднородно анизотропной. Тогда зависимость угла вращения директора от продольной координаты можно представить как

$$\varphi(z) = 2\pi z/p. \quad (1)$$

Каждая плоскость, перпендикулярная оси z , представляет пластины, в которой директор повернут на азимутальный угол φ и полярный угол θ относительно стенок ячейки (см. рис.2).

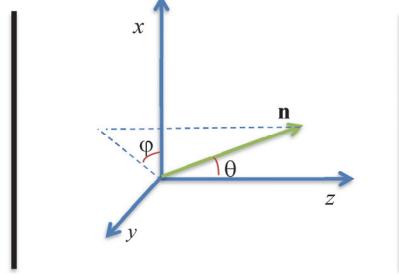


Рис.2. Геометрия задачи: φ – угол между проекцией директора на плоскости (x, y) и осью x ; θ – угол между направлением директора и осью z .

В случае, когда $L < L_{th}$ и переход из гомеотропной конфигурации в ТИК состояния осуществляется посредством влияния внешнего электрического поля, и для полярного возмущения директора имеем синусоидальное распределение [11]:

$$\theta(z) = \theta_{\max} \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right). \quad (2)$$

Диэлектрическая проницаемость такой среды представляется в виде

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{\perp} \delta_{ij} + \epsilon_a n_i n_j. \quad (3)$$

Здесь δ_{ij} – символ Кронекера, $\epsilon_a = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ – анизотропия диэлектрической проницаемости на световой частоте, а \mathbf{n} – единичный вектор (директор), описывающий локальную ориентацию оптической оси, которую можно представить в виде (см. рис.2)

$$n_x(z) = \sin\theta(z)\cos\varphi(z), \quad n_y(z) = \sin\theta(z)\sin\varphi(z), \quad n_z(z) = \cos\theta(z). \quad (4)$$

Исследуем распространение плоской линейно-поляризованной монохроматической волны в непоглощающей слоисто-неоднородной анизотропной ЖК среде. Лабораторную систему координат выберем так, чтобы ось z совпадала с направлением распространения волны, а оси x и y будут определяться направлением внешнего поля. Если среда слоисто-неоднородная, то $\mathbf{n} = \mathbf{n}(z)$.

Для численного анализа в дальнейшем будут использованы следующие параметры: толщина ЖК ячейки $L = 8$ мкм, шаг спирали $p = 8, 9, 10, 18, 36, 72$ мкм. В качестве НЖК с большой концентрацией рассматриваем МВВА, параметры которого хорошо известны [6, 7]: $K_2 = 3.8 \times 10^{-7}$ дин, $K_3 = 7 \times 10^{-7}$ дин, $\epsilon_{\parallel} = 3.1$, $\epsilon_{\perp} = 2.31$. Тогда при минимальном, рассмотренном нами, шаге спирали $p = 8$ для критической толщины получаем $L_{th} = 7.37$ мкм. Это означает, что кроме первого ($p = 8$) случая, во всех остальных рассмотренных случаях шага спирали ($p = 9, 10, 18, 36, 72$ мкм) исходная ориентация однородно гомеотропная ($L < L_{th}$). Применением дестабилизирующего электрического поля или подбором больших толщин можно получить трансляционно инвариантную спиральную конфигурацию.

3. Квазизотропное приближение геометрической оптики

В случае нормального падения на такую среду (параллельно оси z) одну из составляющих светового поля можно исключить с помощью уравнения $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$ и представить двумерное волновое уравнение для E_x и E_y в следующем виде [26–28]:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2 E_i(z)}{dz^2} + \frac{\omega^2}{c^2} h_{ij}(z) E_j(z) &= 0 \\ h_{ij}(z) &= \varepsilon_{ij} - \frac{\varepsilon_{iz} \varepsilon_{jz}}{\varepsilon_{zz}} \\ i, j &= x, y. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Заметим, что в случае неплоской неоднородности анизотропии недиагональные составляющие h_{ij} ($i \neq j$) обеспечивают взаимосвязь между $E_x(z)$ и $E_y(z)$ составляющими.

Метод квазизотропного приближения геометрической оптики основан на предположении, что в слабо неоднородной анизотропной среде волна сохраняет поперечную структуру, как в изотропной среде [29, 30]. Анизотропные свойства среды в общем случае характеризуются тензором

$$v_{ik} = \varepsilon_{ik} - \varepsilon \delta_{ik}, \quad (6)$$

где в качестве изотропной составляющей ε в трехмерном случае можно взять, например,

$$\varepsilon = \frac{1}{3} \operatorname{Sp} \varepsilon_{ik}, \quad (7)$$

а тензор $|v_{ik}| \ll \varepsilon$ рассматривается как возмущение. Соответственно, ищем решение в виде

$$E_i(z) = \frac{J_i(z)}{\sqrt{\phi'(z)}} \exp \left\{ i \frac{\omega}{c} \Phi(z) \right\}. \quad (8)$$

Здесь $\mathbf{J}(z)$ – медленно меняющаяся комплексная амплитуда. Фазовый множитель $\Phi(z)$ имеет вид

$$\Phi(z) = \int \sqrt{\varepsilon(z)} dz, \quad (9)$$

а изотропную составляющую $\varepsilon(z)$ в двумерном случае представим как

$$\varepsilon(z) = \frac{1}{2} \operatorname{Sp} h_{ik}. \quad (10)$$

Подставим (8) в (5) и, пренебрегая вторыми производными $\mathbf{J}(z)$ по z (согласно методу геометрической оптики), получаем

$$\frac{d\mathbf{J}(z)}{dz} = i \frac{\omega}{c} \hat{H}(z) \mathbf{J}(z), \quad (11)$$

где

$$\hat{H}(z) = \frac{h_{xx} - h_{yy}}{4\sqrt{\varepsilon(z)}} \hat{\sigma}_1 + \frac{h_{xy}}{2\sqrt{\varepsilon(z)}} \hat{\sigma}_2,$$

Представляя диэлектрическую проницаемость ε_{ij} такой среды в виде (3), после несложных преобразований получим

$$\hat{H}(z) = \frac{h_{xx} - h_{yy}}{4\sqrt{\varepsilon(z)}} \hat{\sigma}_1 + \frac{h_{xy}}{2\sqrt{\varepsilon(z)}} \hat{\sigma}_2,$$

где $\hat{\sigma}_i$ – матрицы Паули

$$\hat{\sigma}_0 = \hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Полученную систему уравнений (11) необходимо дополнить также граничными условиями

$$E_x(0) = \cos\beta_0; E_y(0) = \sin\beta_0 e^{i\delta}, \quad (13)$$

где β_0 – азимутальный угол входящей линейно-поляризованной волны, а δ – смещение фазы исходной волны, если входная волна является эллиптической.

Система уравнений (11) и граничные условия (13) являются основой анализа распространения поляризованной волны в неоднородно-анизотропной среде. Заметим, интенсивность нормирована на единицу.

4. Результаты и обсуждение

Для детального количественного анализа эволюции состояния поляризации в неоднородно анизотропной среде удобнее воспользоваться параметрами эллиптичности $e(z)$ и азимута $\psi(z)$, которые выражаются составляющими вектора Стокса [31]

$$\mathbf{S}(z) = \mathbf{E}^+(z) \hat{\sigma} \mathbf{E}(z) \quad (14)$$

и следующими соотношениями:

$$e(z) = \operatorname{tg} \left\{ \frac{1}{2} \arcsin S_3(z) \right\}; \quad \psi(z) = \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{S_2(z)}{S_1(z)} \quad (15)$$

Здесь $\hat{\sigma}_i$ матрицы Паули (12).

Для конкретности продольное распределение углов $\varphi(z)$ и $\theta(z)$ представлено в виде (1) и (2). Моделирование системы (11) проведено с помощью пакета Wolfram Mathematica-11. Остановимся на результатах компьютерного моделирования задачи с помощью системы уравнений (11).

На рис.3 представлено поведение вектора Стокса на сфере Пуанкаре. Как видно из этого рисунка, азимутальный угол поляризации входящей волны β_0 не

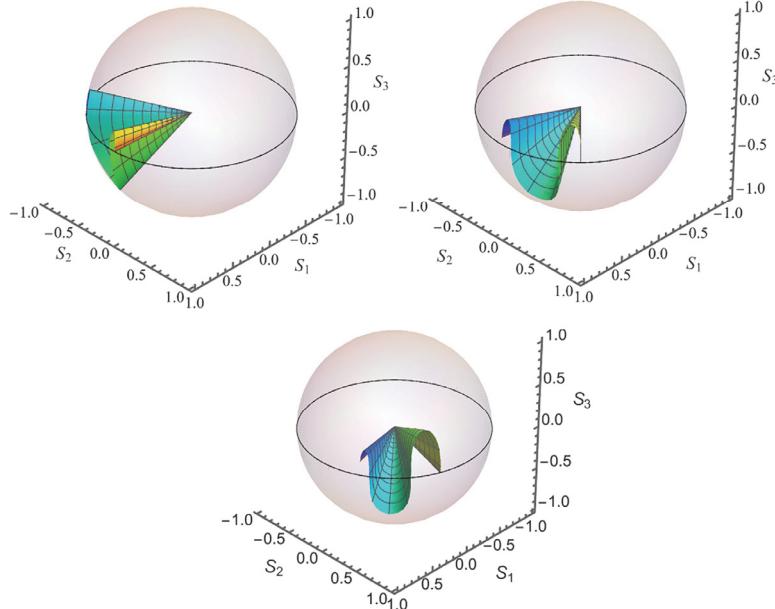


Рис.3. Поведение вектора Стокса на сфере Пуанкаре в XJK с гомеотропными граничными условиями при изменении азимутального угла входной поляризации β_0 : $\beta_0 = 0$ (а), $\pi/8$ (б), $\pi/5$ (с). Остальные параметры: $\epsilon_{\parallel} = 3.1$, $\epsilon_{\perp} = 2.31$, $\lambda = 0.5$ мкм, $L = 8$ мкм, $p = 8$ мкм, $\theta_{\max} = \pi/5$.

влияет на характер пространственной эволюции поляризации внутри среды. Изменение этого угла сводится к вращению общей картины в экваториальной плоскости сферы Пуанкаре (см. рис.3а,б,с). Это означает, что вращение плоскости поляризации падающего линейно-поляризованного света в такой структуре не зависит от угла поляризации падающего света.

На рис.4 представлена зависимость эллиптичности $e(z)$ и азимутального угла $\psi(z)$ от пространственной координаты при разных значениях величины шага спирали (толщина ячейки составляет $L = 8$ мкм). Как видно из рис.4, при близких к толщине ячейки значениях шага спирали ($\sim 8, 10, 18$ мкм) два механизма неоднородности – спиральность и полярный угол θ , вызванный увеличением толщины или внешним полем – конкурируют. В результате появляется характерная осцилляционная картина. При увеличении шага спирали ($p \geq 36$ мкм) начинает преобладать хиральность структуры (см. рис.4, кривые V, Y). При малых значениях шага спирали возможно практическое сохранение линейной поляризации волны при выходе из ячейки. При больших величинах шага спирали зависимость эллиптичности выходящего излучения от шага спирали не монотонна и достигает своего максимума в области шага спирали ~ 40 мкм. Это демонстрируется на рис.5, где представлена 3D зависимость эллиптичности $e(z, p)$ от пространственной координаты и величины шага спирали p . Заметим, что выход молекул из плоскости стен ячейки (появление полярного угла θ) обеспечивается увеличением толщины ячейки или дестабилизирующим электрическим полем. Последнее вызывает переориентацию молекул согласно формуле (см. [11])

$$\sin \theta_{\max} = 2 \sqrt{\frac{E_s}{E_{sc}} - 1}. \quad (16)$$

Здесь E_s – напряженность приложенного к ячейке квазистатического электростатического поля, E_{sc} – его критическое значение, после превышения которого происходит переориентация.

На следующем рис.6а,б представлено влияние полярного угла θ на эволюцию состояния поляризации в неоднородно-анизотропной жидкокристаллической среде.

Из рисунка видно, что с увеличением значения θ_{\max} (т.е. величины напряженности внешнего поля) величина максимально возможной эллиптичности растет (рис.6а). При приведенных нами значениях максимума

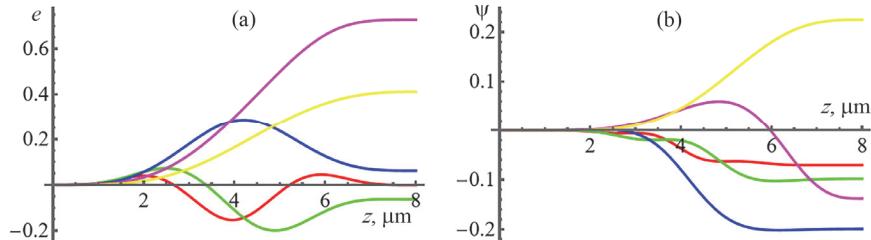


Рис.4. Зависимость параметров эллиптичности $e(z)$ и азимутального угла $\psi(z)$ от пространственной координаты при $L = 8$ мкм, $\theta_{\max} = \pi/8$. Шаг спирали: $p = 8$ (R), $p = 10$ (G), $p = 18$ (B), $p = 36$ (V) и $p = 72$ мкм (Y). Азимутальный угол входной поляризации $\beta_0 = 0$. Остальные параметры такие же, как и на рис.3.

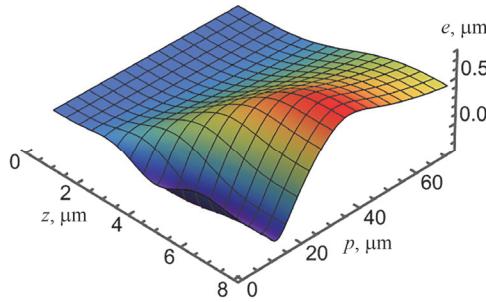


Рис.5. 3D зависимость эллиптичности $e(z, p)$ от пространственной координаты и величины шага спирали при $\beta_0 = 0$, $\theta_{\max} = \pi/8$. Остальные параметры такие же, как и на рис.3

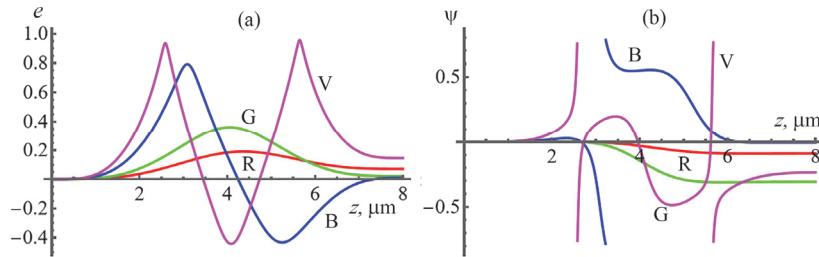


Рис.6. Зависимость параметров эллиптичности $e(z)$ и азимутального угла $\psi(z)$ от пространственной координаты при $L = 8$ мкм, $\theta_{\max} = \pi/10$ (R), $\pi/7$ (G), $\pi/4$ (B), $\pi/3$ (V). Азимутальный угол входной поляризации $\beta_0 = 0$, $p = 18$ мкм. Остальные параметры такие же, как и на рис.3.

полярного угла падающая линейно-поляризованная волна выходит почти линейной, в некоторых (G, B) значениях θ_{\max} система просто вращает плоскость линейной поляризации. Это означает, что подходящим выбором напряженности электрического поля можно получить возможность вращения плоскости поляризации света, не зависящей от исходной поляризации. Как видно из рис.6b, в поведении азимутального угла $\psi(z)$ при увеличении θ_{\max} наблюдаются скачки. Однако эти скачки не являются действительным нарушением непрерывности. Как следует из (15), эти скачки обусловлены поведением функции $\operatorname{tg}2\psi(z)$ вблизи угла $\pi/4$. Это следствие того, что диапазон значений азимута ограничен от $-\pi/2$ до $+\pi/2$. При увеличении шага спирали число осцилляций увеличивается, разрывы в зависимости $\psi(z)$ смещаются в сторону начала координат.

Проведем более общий анализ. На рис.7 приведена 3D зависимость эллиптичности $e(z, \theta_{\max})$, которая демонстрирует возможность управления поляризацией выходящей волны с помощью внешнего поля (см. (16)). Как следует из рисунка, при определенных, дискретных, значениях полярного угла θ_{\max} (величины напряженности поля) эллиптичность волны на выходе равна нулю.

Например, построив зависимость $e(\theta_{\max})$ на выходе из ячейки, нетрудно заметить, что нулевому значению эллиптичности соответствуют $\theta_{\max} \sim 0.48, 1.2$ и т.д. В этом случае выходящая волна линейно-поляризована. Зависимость пространственного распределения азимутального угла ψ при первом значении θ_{\max}

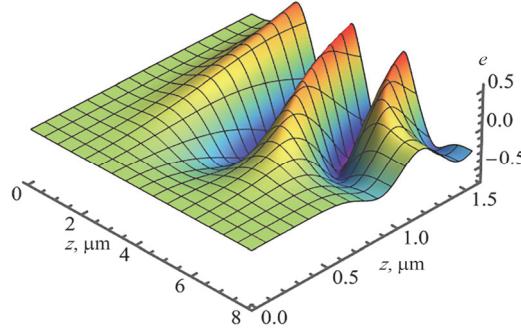


Рис.7. 3D зависимость параметра эллиптичности $e(z, \theta_{\max})$ от пространственной координаты и θ_{\max} при $L = 8$ мкм, $\beta_0 = 0$, $p = 8$ мкм. Остальные параметры такие же, как и на рис.3.

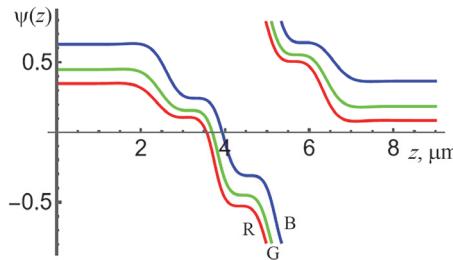


Рис.8. Зависимость азимутального угла $\psi(z)$ от пространственной координаты при $L = 8$ мкм, $\theta_{\max} = 0.48$ рад, $p = 8$ мкм. Азимутальный угол входной поляризации $\beta_0 = \pi/9$ (R), $\pi/7$ (G), $\pi/5$ (B). Остальные параметры такие же, как и на рис.3.

представлена на рис.8. Как следует из этого рисунка, пространственная эволюция угла поляризации света при распространении через структуру не зависит от ее начального значения. Азимутальный угол на выходе поворачивается на одну и ту же величину, т.е. при таких значениях напряженности поля величина поворота не зависит от азимутального угла исходной волны. Заметим, этот вывод полностью согласуется с ранее полученным результатом (см. рис.3).

Обсудим зависимость поведения системы от длины волны. Результаты расчета приведены на рис.9. Как следует из рис.9а, поведение эллиптичности $e(z, \lambda)$ практически не зависит от длины волны. В зависимости азимутального угла $\psi(z, \lambda)$ от длины волны появляются две области (см. рис.9б). В диапазоне 0.3–0.5 мкм наблюдается значительная зависимость от длины волны, которая усиливается при увеличении θ_{\max} .

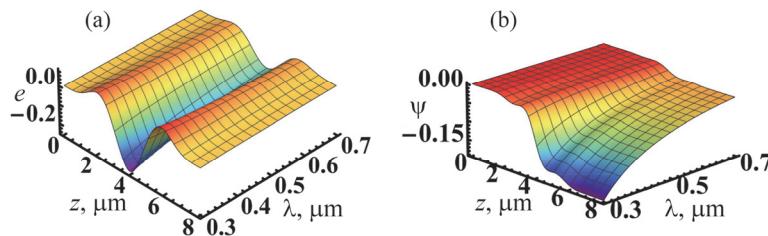


Рис.9. 3D зависимости параметров эллиптичности $e(z, \lambda)$ и азимутального угла $\psi(z, \lambda)$ от пространственной координаты и длины волны при $L = 8$ мкм, $p = 8$ мкм, $\theta_{\max} = \pi/4$. Остальные параметры такие же, как и на рис.3.

5. Заключение

В настоящей работе исследованы поляризационные свойства света, прошедшего через тонкую пленку ХЖК с гомеотропными граничными условиями в присутствии внешнего дестабилизирующего электрического поля. Исследования проводились в режиме ТИК, когда распределение директора ЖК в плоскостях, параллельных стенкам ячейки, однородно и вращает поляризацию света. Показано, что пространственная эволюция линейно-поляризованной волны не зависит от азимутального угла входящей волны. Обнаружена немонотонная зависимость величины эллиптичности от шага спирали. Показано, что максимум эллиптичности наблюдается при ~ 40 мкм. Показано, что пространственная эволюция эллиптичности практически не зависит от длины волны, тогда как для азимутального угла независимость от длины волны наблюдается в видимом диапазоне. Последнее свойство позволит реализовать ахроматическое устройство, вращающее плоскость поляризации света.

Заявление о наличии данных: Все подтверждающие данные можно получить у авторов по соответствующему запросу.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке РА в рамках научного проекта № 21AG-1C088.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Oswald, G. Poy, J. Ignés-Mullol. Crystals, **13**, 957(2023).
2. M.T. Máthé, N. Éber, Á. Buka, H. Nishikawa, F. Araoka, A. Jákli, P. Salamon. Journal of Molecular Liquids, **428**, 127525 (2025).
3. A.H. Gevorgyan, F. Simoni. Liquid Crystals, **51**, 2265, (2024).
4. L. Lucchetti, G. Nava. Giant, **19**, 100311, (2024).
5. A.H. Gevorgyan, S.S. Golik. Optics & Laser Technology, **149**, 107810 (2022).
6. P.G. de Gennes, J. Prost. The Physics of Liquid Crystals. Oxford, Oxford University Press, 1993.
7. L.M. Blinov. Structure and Properties of Liquid Crystals. London, New York, Springer, 2011.
8. M. Mitov. Adv Mater., **24**, 6260 (2012).
9. P.E. Cladis, M. Kleman. Mol. Cryst. Liq. Cryst., **16**, 1 (1972).
10. I.I. Smalyukh, B. Senyuk, P. Palffy-Muhoray, O.D. Lavrentovich, H. Huang, E.C. Gartland, V.H. Bodnar, T. Kosa, B. Taheri. Phys Rev E., **72**, 061707 (2005).
11. S. Singh. Handbook of Liquid Crystals. V. I, II Foundations and Fundamental Aspects. London, New York, Springer, 2024.
12. I.C. Khoo, F. Simoni, C. Umeton. Optical Materials and Applications V.1 Novel Optical Materials. London, World Scientific, 2024.
13. B.Ya. Zeldovich, N.V. Tabiryan. JETP Lett., **34**, 406 (1981).
14. V.S. Hakobyan, T.V. Galstian, R.S. Hakobyan. J. Contemp. Physics, **60**, 50 (2025).
15. M.J. Press, A.S. Arrott. J. Phys. (Fr.), **37**, 387 (1976).
16. P. Oswald, J. Bechhoefer, A. Libchaber, F. Lequeux. Phys. Rev. A, **36**, 5832 (1987).
17. F. Lequeux, P. Oswald, J. Bechhoefer. Phys. Rev. A, **40**, 3974 (1989).
18. J.M. Gilli, S. Thibierge, A. Vierheilig, F. Fried. Liq. Cryst. **23**, 619 (1997).
19. L. Gil, J.M. Gilli. Phys. Rev. Lett., **80**, 5742 (1998).
20. J. Baudry, S. Pirkl, P. Oswald. Phys. Rev. E, **57**, 3038 (1998); **59**, 5562 (1999).

21. **T. Ishikawa, O.D. Lavrentovich.** Phys. Rev. E, **60**, R5037 (1999).
22. **O.S. Tarasov, A.P. Krekhov, L. Kramer.** Phys. Rev. E, **68**, 031708 (2003).
23. **R.S. Akopyan, R.B. Alaverdyan, V.V. Saakyan, Yu.S. Chilingaryan.** Krystall, 30, 746 (1985).
24. **R.S. Akopyan, R.B. Alaverdyan, Yu.S. Chilingaryan.** Sov. J. Contemp. Phys., **21**, 77 (1986).
25. **P. Ribièrè, S. Pirkle, P. Oswald.** Liq. Cryst., **16**, 203 (1994).
26. **A.L. Aslanyan, L.S. Aslanyan, Yu.S. Chilingaryan.** Optics and Spectroscopy, **116**, 483 (2014).
27. **L.S. Aslanyan, H.H. Hovakimyan.** JOSA B, **37**, 847 (2020).
28. **L.S. Aslanyan, A.E. Ayvazyan.** J. Contemp. Physics, **58**, 59 (2023).
29. **Ю.А. Кравцов.** ДАН СССР, **183**, 74 (1968).
30. **Yu.A. Kravtsov, B. Bieg.** Cent. Eur. J. Phys., **6**, 563 (2008).
31. **D.H. Goldstein.** Polarized Light. CRC Press, Boca Raton, 2017.

**ՀՈՄԵՈՏՐՈՊ ՍԱՀՄԱՆԱՅԻՆ ՊԱՅՄԱՆՆԵՐՈՎ ԽՈԼԵՍԵՐԻԿ
ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔԻ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ**

Լ.Ս. ԱՍԼԱՆՅԱՆ, Ռ.Բ. ԱԼԱՎԵՐԴՅԱՆ, Ա.Հ. ՄԱԿԱՐՅԱՆ, Ռ.Ս. ՀԱԿՈԲՅԱՆ

Ալիքային հավասարումից երկրաչափական օպտիկայի քվազիկոտրոպ մոտավորությամբ ստացված կապված հավասարումների համակարգի համակարգային մոդելավորմամբ ուսումնասիրվել են հոմեոտրոպ սահմանային պայմաններով խոլեստերիկ կառուցվածքի օպտիկական հատկությունները: Տարածականորեն համաստու կոնֆիգուրացիան ստացվում է կրիտիկականից մեծ հաստությունների դեպքում, ինչպես նաև կրիտիկականից փոքր հաստությունների համար անկայունացնող էլեկտրական դաշտի կիրառմամբ: Պարույրի քայլի մեծ արժեքների դեպքում, կառուցվածքից դուրս եկած ձառագայթման էլիպտականության կախվածությունը պարույրի քայլից մոնուռն չէ և հասնում է իր առավելագույնին 40 մկմ պարույրի քայլի դեպքում: Ցույց է տրված, որ բջջի պատերի հարթությունից մոլեկուլների շեղման առավելագույն անլյան որոշ դիսկրետ արժեքների համար, ընկնող գծային բևեռացված լույսի բևեռացման հարթության պառույրը կախված չէ ոչ ընկնող լույսի բևեռացման անլյունից, ոչ ոք լույսի ալիքի երկարությունից, գոնեւ տեսանելի տիրույթում:

OPTICAL PROPERTIES OF CHOLESTERIC STRUCTURE WITH HOMEOTROPIC BOUNDARY CONDITIONS

L.S. ASLANYAN, R.B. ALAVERDYAN, A.H. MAKARYAN, R.S. HAKOBYAN

The optical properties of a cholesteric structure with homotropic boundary conditions were investigated using computer modeling methods of the wave equation in the quasi-isotropic approximation of geometric optics. A translation-invariant configuration was obtained for thicknesses greater than the critical thickness, as well as for thicknesses less than the critical thickness, by applying a destabilizing electric field. At large spiral pitch values, the dependence of the ellipticity of the outgoing radiation on the spiral pitch is not monotonic and reaches its maximum in the region of a spiral pitch of 40 μm . It is shown that for some discrete values of the maximum angle of exit of molecules from the plane of the cell walls, the rotation of the polarization plane of incident linearly polarized light does not depend on either the polarization angle of the incident light or the wavelength of the light, at least in the visible range.

Известия НАН Армении, Физика, т.60, №4, с.496–504 (2025)

УДК 535.343

DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.4-496

ОПТИЧЕСКАЯ МАГНИТОМЕТРИЯ ИНДУЦИРОВАННЫХ ВНЕШНИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ В КАТУШКАХ ГЕЛЬМГОЛЬЦА РАЗМЕРОМ С ЧЕЛОВЕКА

А. ТОНОЯН, А. ПАПОЯН, А. ГОГЯН*

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: agogyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 21 ноября 2025 г.)

Мы представляем моделирование и анализ эволюции магнитного поля, генерируемого медными катушками человеческого размера при наличии proximity внешних металлических объектов. Изменение магнитного поля может быть эффективно обнаружено с использованием эффекта Зеемана при резонансном взаимодействии света с щелочными атомами, заключенными в нанометрические или микрометрические тонкие ячейки. Для количественного определения этих изменений мы анализируем спектры взаимодействия свет–атом в присутствии магнитного поля и предлагаем алгоритм, позволяющий измерять изменения магнитного поля, индуцированные относительно небольшим железным шаром. Ключевое преимущество нашего подхода — его устойчивость: он позволяет извлекать информативные параметры из экспериментальных спектров без необходимости прямого опорного спектра.

1. Введение

За последние десятилетия значительные исследовательские усилия были направлены на изучение атомной спектроскопии термических паров щелочных металлов, находящихся во внешних магнитных полях, особенно в контексте оптической магнитометрии [1–6]. Эта область претерпела существенный прогресс, и современные передовые магнитометры обеспечивают исключительно высокую чувствительность [7, 8]. Такие высокотехнологичные магнитометры в первую очередь предназначены для измерения крайне слабых магнитных полей в хорошо экранированных условиях. В результате они нашли успешное применение в различных областях, включая регистрацию биомагнитных полей [9, 10] и обнаружение скрытых ферромагнитных объектов [11]. Однако важно отметить, что помимо этих направлений использования, подобные магнитометры обладают широким потенциалом применения. Например, они могут использоваться в ядерной магнитной томографии для точного измерения и картирования магнитных полей с большими градиентами. Кроме того, они востребованы при удалённом мониторинге ядерных реакторов и юстировке ускорителей частиц [12]. Эффективность магнитометров в таких задачах определяется рядом ключевых факторов, выходящих за рамки простой оптимизации чувствительности при помощи дорогостоящих (и сложных) схем измерений. Внимание смещается в сторону решения других критически важных задач, включая высокое пространственное

разрешение, устойчивость к внешним возмущениям, широкий динамический диапазон измерений, надёжную и автономную работу, а также возможность функционирования без экранирования.

Современные методы магнитометрии обладают значительными возможностями для обнаружения металлических предметов, особенно ферромагнитных материалов, а также для регистрации электрических токов. Создание устойчивых и эффективных систем дистанционного обнаружения магнитного поля в пунктах безопасности требует не только высокой чувствительности, но и устойчивости к различным факторам окружающей среды, включая фоновые магнитные поля, температурные дрейфы, электрические шумы и др. Одним из наиболее перспективных решений, удовлетворяющих этим требованиям, является оптическая магнитометрия, основанная на резонансном взаимодействии лазерного излучения с атомной средой. Схемы оптической магнитометрии хорошо подходят для чувствительной регистрации слабых магнитных полей, сопоставимых или даже меньших по величине, чем магнитное поле Земли (~ 0.5 Гс) [13]. Однако в условиях, таких как аэропорты, где металлические предметы и электронное оборудование создают изменяющиеся во времени и пространстве фоновые магнитные поля, для обеспечения точности измерений становится необходимым магнитное экранирование области детектирования.

В настоящее время ведутся разработки двух ключевых компонентов: (i) системы динамической компенсации магнитного поля на основе трёхосных катушек [14], установленных вокруг зоны контроля и использующих атомный (оптический) сигнал ошибки в режиме реального времени; (ii) чувствительного широкодиапазонного оптического магнитометра на основе оптических наноячеек [15, 16].

Система компенсации подаёт сигнал тревоги, когда человек или предмет, проходящий через зону контроля, создаёт магнитное поле или изменяет его фоновое значение сверх установленного порога. Для продвижения разработки оптических магнитометров для применения в пунктах безопасности мы сосредоточили внимание на моделировании и анализе изменения магнитного поля, создаваемого медными катушками человеческого размера при внесении во внешнюю область металлических объектов. Рассматриваются различные варианты форм, размеров и материалов таких объектов.

В Разделе II представлена модель трёх пар медных катушек, после чего приводятся расчёты и моделирование магнитного поля. В Разделе III мы рассматриваем теоретическое исследование того, как модифицированное магнитное поле может быть обнаружено посредством регистрации спектров щелочных атомов с использованием эффекта Зеемана при резонансном взаимодействии света с атомами, заключёнными в нанометрически или микрометрически тонкие ячейки.

2. Магнитное поле, создаваемое катушками человеческого размера

2.1. Модель

Геометрия трёх взаимно перпендикулярных пар катушек представлена на рис.1. Радиус каждой катушки составляет около 1 м; для изоляции предусмотрено 1.2 см межкатушечного зазора. Каждая катушка содержит 120 витков медного провода диаметром 1 мм.

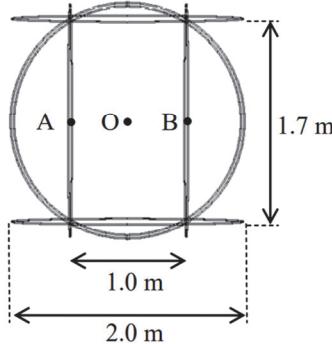


Рис.1. (а) Три пары медных катушек, расположенных перпендикулярно друг другу. Радиус каждой катушки составляет около 1 м; две пары разнесены на 1 м, третья вертикальная пара в направлении z разнесена на расстояние $\sqrt{3} \simeq 1.7$ м.

Две пары катушек располагаются на расстоянии 1 м друг от друга, тогда как третья пара в вертикальном направлении — на расстоянии 1 м, что обеспечивает возможность прохода человека. Магнитное поле \mathbf{B} в точке \mathbf{r} согласно закону Био–Савара:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_C \frac{I d\mathbf{l} \times \mathbf{r}'}{|\mathbf{r}'|^3}, \quad (1)$$

где I — ток, $d\mathbf{l}$ — элемент провода, \mathbf{R} — вектор от элемента катушки к точке наблюдения. Расчёты выполнены по методике [17].

Оценки показывают, что постоянный электрический ток величиной 18 А создаёт магнитное поле порядка 24 Гс в центре системы катушек, если токи в противоположно расположенных катушках направлены в одну и ту же сторону. Потенциальным недостатком такой системы является нагрев катушек при работе на больших токах; однако эта проблема может быть эффективно устранена с помощью охлаждения катушек.

Направление и величина токов, проходящих через катушки, позволяют использовать различные физические явления для измерения искажения магнитного поля, возникающего при помещении металлического объекта между катушками. В настоящей работе мы сосредоточимся на случае, когда токи направлены одинаково. В этом случае зеемановские сдвиги атомных уровней в ячейке, заполненной щелочными атомами, позволяют обнаруживать изменение магнитного поля ~ 1 Гс. Использование других физических процессов для детектирования магнитного поля позволяет работать при более слабых электрических токах около ~ 1 А, создающих более слабые магнитные поля (~ 2 Гс), например, при использовании эффекта Ханле [18]. Более подробное обсуждение физических процессов изменения магнитного поля приведено в Разделе III.

2.2. Изменение магнитного поля

Результаты моделирования магнитного поля для геометрии, представленной на рис.1, показаны на рис.2. Между катушками формируется достаточно однородное магнитное поле внутри сферы диаметром ~ 1 м. Верхний график представляет собой поверхностный распределённый график магнитного поля (в единицах Гс) в сечении при $z = 0$. Одномерное распределение магнитного поля при $y = 0, z = 0$ более наглядно демонстрирует его величину. При протекании

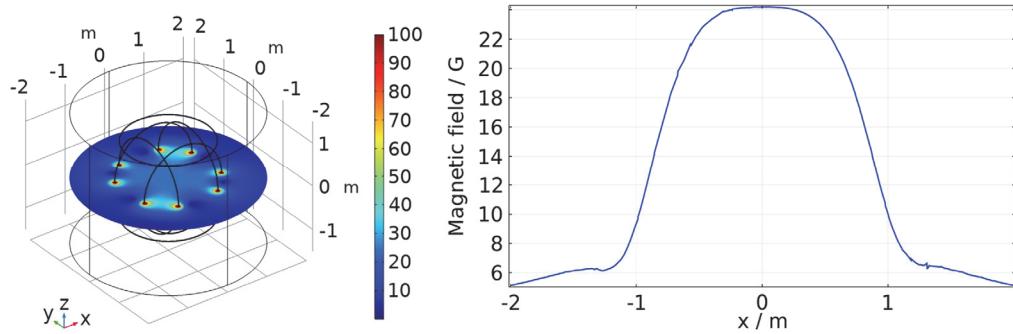


Рис.2. Смоделированное магнитное поле, создаваемое катушками, представленными на рис.1. Ток в каждой катушке составляет 18 А, направления токов в каждой встречной паре совпадают. Сечение распределения магнитного поля при $z = 0$ (слева). Одномерное распределение магнитного поля при $y = 0, z = 0$ (справа).

электрического тока 18 А через каждую катушку максимальное значение нормированного магнитного поля между катушками достигает ~ 24 Гс. Направления токов в каждой противоположной паре катушек совпадают.

На следующем этапе мы рассмотрели железную сферу радиусом 5 см, размещённую на расстоянии 10 см от центра системы катушек в точке $x = 0.1$, $y = 0.1$, $z = 0.1$ м. Смоделированное магнитное поле показано на рис.3. Направления и величины постоянного тока остаются такими же, как в случае рис.2. Из-за присутствия железной сферы магнитное поле между катушками искажается, причём наблюдается увеличение примерно на 2 Гс, что может быть зарегистрировано экспериментально. В следующем разделе мы подробно рассмотрим принципы оптического обнаружения этого изменения магнитного поля.

3. Измерение магнитного поля с использованием щелочных атомов

Существуют различные оптические явления, позволяющие измерять магнитные поля: вращение Фарадея, эффект Зеемана, эффект Ханле, магнитный циркулярный дихроизм, эффект Керра и др. Здесь мы сосредоточимся на эффекте Зеемана.

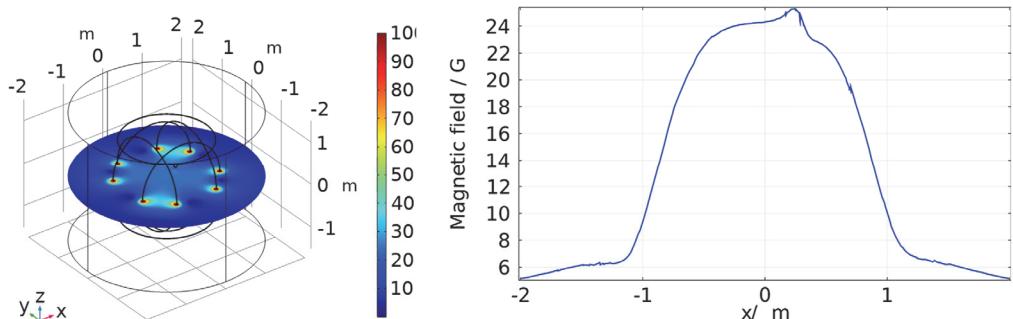


Рис.3. Те же графики, что и на рис.2, но при помещении железной сферы радиусом 5 см в точке $x = 0.1$, $y = 0.1$, $z = 0.1$ м. Сечение распределения магнитного поля при $z = 0$ (слева), и одномерное распределение магнитного поля при $y = 0, z = 0$ (справа).

Мы рассматриваем два сценария: один с одной ячейкой и другой с двумя ячейками, обе из которых заполнены щелочными атомами и размещены вблизи катушек. Для простоты в случае одной ячейки она располагается в точке $x = 0.5$ м, $y = 0$, $z = 0$. В случае двух ячеек вторая ячейка может быть размещена возле противоположной катушки в точке $x = -0.5$ м, $y = 0$, $z = 0$. В обоих случаях атомы взаимодействуют с лазерным излучением, и регистрируется соответствующий спектр. В конфигурации с двумя ячейками получаются два спектра, которые впоследствии могут быть сравнены между собой. Сравнение спектров из двух различных точек обеспечивает более точное наблюдение вариаций магнитного поля.

Для определения внешнего или приложенного магнитного поля по экспериментальным спектрам нами разработан простой алгоритм, основанный на частотах трёх переходов и не требующий дополнительного опорного спектра. Программа точно определяет положения и интенсивности трёх пиков в экспериментальных данных и затем сравнивает их с теоретическими значениями. Благодаря такому сравнению алгоритм позволяет определить величину магнитного поля с точностью лучше 1%.

Теоретические спектры получены путём моделирования энергий магнитных подуровней и вероятностей переходов на основе модели, описанной в работах [19, 20]. Вероятность перехода из возбуждённого состояния e в основное состояние g пропорциональна квадрату дипольного момента:

$$W_{eg} \propto \left(\sum_{F'_e, F'_g} \alpha_{F_e F'_e}^e a(\Psi(F_e, m_e); \Psi(F_g, m_g); q) \alpha_{F_g F'_g}^g \right)^2, \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} a(\Psi(F_e, m_e); \Psi(F_g, m_g); q) = \\ (-1)^{1 + I + J_e + F_e + F_g - m_e} \sqrt{2J_e + 1} \sqrt{2F_e + 1} \sqrt{2F_g + 1} \times \\ \times \begin{pmatrix} F_e & 1 & F_g \\ -m_e & q & m_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_e & 1 & F_g \\ J_g & I & J_e \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3)$$

является ненарушенным коэффициентом перехода, а $\alpha_{F_e F'_e}^e$ и $\alpha_{F_g F'_g}^g$ — коэффициентами смешивания для возбуждённого и основного состояний, соответственно. Круглые и фигурные скобки обозначают соответственно символы $3j$ и $6j$.

Для численных расчётов мы рассматриваем переход σ^+ линии D_1 атомов ^{87}Rb для обратной идентификации магнитного поля. Спектры перехода σ^+ линии D_1 ^{87}Rb при внешнем магнитном поле 24 (кривая 1) и 26 Гс (кривая 2) представлены на рис.4а при ширине лазерной линии 10 МГц. Всего существует 12 переходов, которые перекрываются при слабых магнитных полях. Высокочастотное крыло (рис.4б) и низкочастотное крыло (рис.4с) приведены отдельно для более наглядного отображения спектров. Очевидно, что изменение магнитного поля всего на 2 Гс приводит к заметному изменению атомного спектра.

На рис.4 переходы $F_g = 1, m_{Fg} = 1 \rightarrow F_e = 2, m_{Fe} = 2$ и $F_g = 1, m_{Fg} = 0 \rightarrow F_e = 2, m_{Fe} = 1$ обозначены v_1 и v_2 , а на Рис.4с переход $F_g = 2, m_{Fg} = -2 \rightarrow F_e = 2, m_{Fe} = -1$ обозначен как v_3 .

Когда используется только одна ячейка, предлагается измерить частотные расстояния между указанными переходами и вычислить отношение $R = (v_1 - v_2)/(v_2 - v_3)$. Сопоставив полученное значение с теоретической кривой,

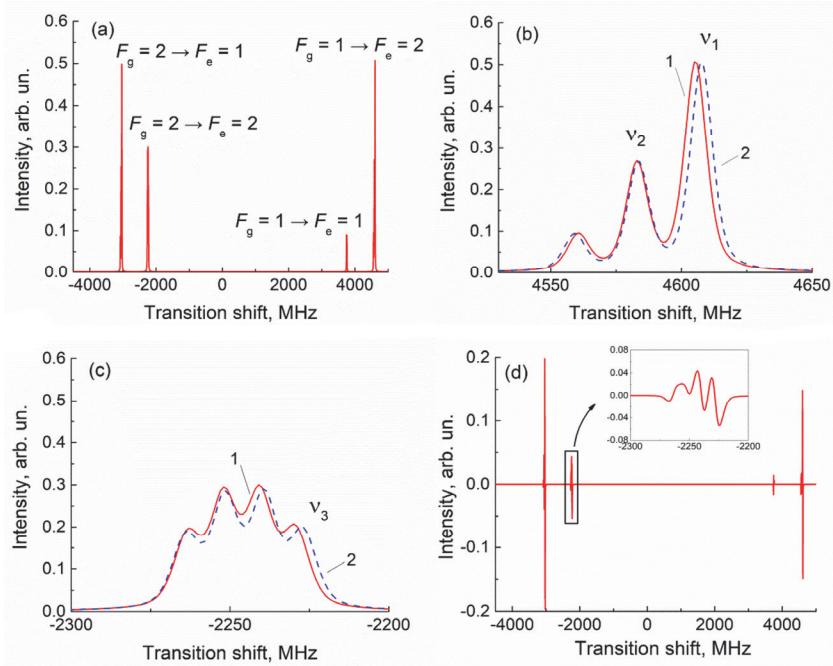


Рис.4. (a) Спектр перехода σ^+ линии D_1 атомов ^{87}Rb при внешнем магнитном поле 24 Гс. Спектры при 24 (кривая 1) и 26 Гс (кривая 2) для (b) высокочастотного крыла с частотами v_1 и v_2 переходов $F_g = 1, m_{Fg} = 1 \rightarrow F_e = 2, m_{Fe} = 2$ и $F_g = 1, m_{Fg} = 0 \rightarrow F_e = 2, m_{Fe} = 1$, соответственно; и (c) низкочастотное крыло с частотой v_3 перехода $F_g = 2, m_{Fg} = -2 \rightarrow F_e = 2, m_{Fe} = -1$. (d) Разность спектров при 24 и 26 Гс, а на вставке увеличенный отрезок в интервале от -2300 до -2200 Гс.

можно определить величину искажённого магнитного поля.

Если используются две ячейки, регистрируются два спектра из двух различных точек, после чего определяется их разность. На рис.4d представлена разность спектров при магнитных полях 24 и 26 Гс. Эта разность позволяет заключить, что магнитное поле между катушками изменено внешним металлическим объектом.

Сравнение двух различных спектров повышает точность измерений. Изменение тока в катушках приводит к изменению магнитного поля в точке расположения ячейки. Вторая ячейка, помещённая в другом месте, взаимодействует с иным магнитным полем по сравнению с первой. Следовательно, дифференциальный сигнал может быть получен либо за счёт изменения постоянного тока в катушках (в случае одной ячейки), либо за счёт изменения геометрического положения (в случае двух ячеек).

Мы также рассмотрели линии D_1 и D_2 различных изотопов щелочных атомов: ^{85}Rb , ^{87}Rb , ^{133}Cs , ^{39}K , и ^{23}Na . Среди них переход σ^+ линии D_1 атомов ^{23}Na оказался наиболее подходящим для обратной идентификации магнитного поля. Сравнение отношения R для ^{23}Na и ^{87}Rb представлено на рис.5. Кривая для ^{23}Na возрастает быстрее, чем для ^{87}Rb , что упрощает более точное определение магнитного поля до 50 Гс с использованием натриевых атомов.

Однако мы не приводим детальный анализ для натрия из-за его ограниченной доступности, тогда как ячейки, заполненные рубидием, и лазеры на

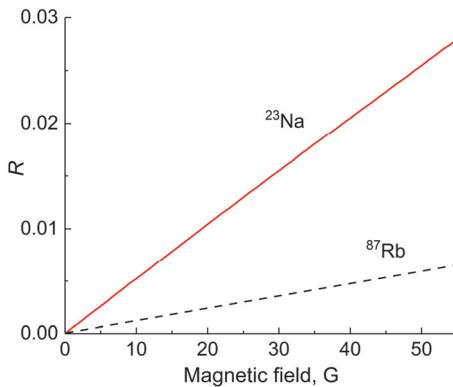


Рис.5. Отношение R частот переходов во внешнем магнитном поле для ^{87}Rb и ^{23}Na .

соответствующую длину волны встречаются значительно чаще.

Применение других физических процессов для детектирования магнитного поля, например эффекта Ханле, позволяет использовать более слабые электрические токи. Например, электрический ток порядка ~ 1 А создаёт магнитное поле величины $\sim 0.1\text{--}0.2$ мГс при протекании в катушках, ориентированных навстречу друг другу. Такое поле может быть зарегистрировано экспериментально в конфигурации Ханле [21, 22]. Исследование этой потенциальной модернизации оптических магнитометров для применения в системах контроля безопасности будет продолжено и подробно изложено в будущих публикациях.

4. Заключение

Мы рассчитали и промоделировали магнитное поле, создаваемое тремя параметрами медных катушек человеческого размера. Мы продемонстрировали изменение магнитного поля при помещении сравнительно небольшого железного шара между катушками. Мы показали, каким образом это изменение магнитного поля может быть обнаружено с использованием зеемановского сдвига, возникающего при резонансном взаимодействии щелочных атомов со светом. Предложен алгоритм для измерения изменения магнитного поля, вызванного внешним объектом, в конфигурации с одной ячейкой. В случае использования двух ячеек могут быть зарегистрированы спектры в двух разных точках вблизи катушек и проанализирована их разность.

Изменение токов в катушках или добавление второй ячейки создаёт дифференциальный сигнал, повышающий точность измерений. Устойчивость нашего подхода заключается в его способности извлекать информативные данные из экспериментальных спектров без необходимости прямого опорного спектра. Такой метод повышает надёжность и универсальность идентификации магнитного поля в различных условиях.

Авторы выражают благодарность проф. Д. Саркисяну и д-ру А. Саргсяну за ценные обсуждения и комментарии.

Работа поддержана проектом НАТО Science for Peace and Security (N G5794), а также Комитетом по высшему образованию и науке Республики Армения (проекты № 24-2PTS-1C003, 24-2PTS-1C004).

ЛИТЕРАТУРА

1. **D. Budker, D.F.J. Kimball.** Optical Magnetometry, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2013.
2. **E. Arimondo, M. Inguscio, P. Violino.** Rev. Mod. Phys., **49**, 31 (1977).
3. **D. Budker, W. Gawlik, D.F. Kimball, S.M. Rochester, V.V. Yashchuk, A. Weis.** Rev. Mod. Phys., **74**, 1153 (2002).
4. **M.S. Safronova, D. Budker, D. DeMille, D.F.J. Kimball, A. Derevianko, C.W. Clark.** Rev. Mod. Phys., **90**, 025008 (2018).
5. **A. Tonoyan, A. Sargsyan, E. Klinger, G. Hakhumyan, C. Leroy, M. Auzinsh, A. Papoyan, D. Sarkisyan.** Europhysics Lett., **121**, 53001 (2018).
6. **A. Sargsyan, D. Sarkisyan.** J. Applied Spectroscopy, **92**, 1008 (2025).
7. **T. Wang, W. Lee, M. Limes, T. Kornack, E. Foley, M. Romalis.** Nature Communications, **16**, 1374 (2025).
8. **J.M. Taylor, P. Cappellaro, L. Childress, L. Jiang, D. Budker, P.R. Hemmer, A. Yacoby, R. Walsworth, M.D. Lukin.** Nature Physics, **4**, 810 (2008).
9. **G. Bison, N. Castagna, A. Hofer, P. Knowles, J.L. Schenker, M. Kasprzak, H. Saudan, A. Weis.** Appl. Phys. Lett., **95**, 173701 (2009).
10. **S. Taue, Y. Sugihara, T. Kobayashi, S. Ichihara, K. Ishikawa, N. Mizutani.** IEEE Transactions on Magnetics, **46**, 3635 (2010).
11. **A. Beaumont, D. Giloteaux, A.V. Matheoud, M. Buzio, G. Boero.** Rev. Scientific Instruments, **91**, 105001 (2020).
12. **J.V. Wallbank, M. Amodeo, A. Beaumont, M. Buzio, V. Di Capua, C. Grech, N. Sammut, D. Giloteaux.** Electronics, **10**, 2140 (2021).
13. **D. Budker, M. Romalis.** Nature Physics, **3**, 227 (2007).
14. **A. Sheinker, L. Frumkis, B. Ginzburg, N. Salomonski, B.-Z. Kaplan.** IEEE Transactions on Magnetics, **45**, 160 (2009).
15. **D. Sarkisyan, D. Bloch, A. Papoyan, M. Ducloy.** Opt. Commun., **200**, 201 (2001).
16. **A. Sargsyan, A. Tonoyan, G. Hakhumyan, C. Leroy, Y. Pashayan-Leroy, D. Sarkisyan.** Europhysics Lett., **110**, 23001 (2015).
17. **S.H.C.E. Edmund.** The Magnetic Field of a Finite Solenoid (Technical Note D-465). National Aeronautics and Space Administration, Washington, USA, 1960.
18. **A. Kastler.** Phys. Bl., **30**, 394 (1974).
19. **P. Tremblay, A. Michaud, M. Levesque, S. Theriault, M. Breton, J. Beaubien, N. Cyr.** Phys. Rev. A, **42**, 2766 (1990).
20. **A. Sargsyan, A. Amiryan, A. Tonoyan, E. Klinger, D. Sarkisyan.** Phys. Lett. A, **390**, 127114 (2021).
21. **H.J. Lee, H.S. Moon.** J. Opt. Soc. Am. B, **30**, 2301 (2013).
22. **H. Moon, H. Kim.** Opt. Express, **22**, 18604 (2014).

ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՄԱԳՆԻՏՈՄԵՏՐԻԱ ՄԱՐԴԱՐԱՓ ՀԵԼՄԱՀՈԼԴԻ ԿԾԻԿՆԵՐՈՒՄ
ԱՌԱՋԱՑՎՈՂ ԱՐՏԱԾԻՆ ՄԱԳՆԻՏՈՄԵՏՐԻ ՀԱՄԱՐ

Ա. ՏՈՆՈՅԱՆ, Ա. ՊԱՊՈՅԱՆ, Ա. ԳՈԳՅԱՆ

Ներկայացնում ենք մարդու չափերի պղնձյա կոճերի կողմից առաջացվող մագնիսական դաշտի փոփոխությունների մոդելավորումը և վերլուծությունը, երբ դրանց մերձակայքում տեղակայվում են մետաղական առարկաներ: Մագնիսական դաշտի փոփոխությունը արդյունավետորեն կարող է հայտնաբերվել Զեմանի երևոյթի միջոցով, երբ լույսը ռեզնանսային կերպով փոխազդում է նանոմետրական կամ միկրոմետրական հաստությամբ բջիջներում գտնվող ալկալի ատոմների հետ: Այդ փոփոխությունները ձգրիտ զնահատելու համար վերլուծում ենք լույս-ատոմ փոխազդեցության սպեկտրները մագնիսական դաշտի ներկայությամբ և ներկայացնում ալգորիթմ, որի միջոցով հնարավոր է չափել համեմատաբար փոքր երկաթյա գնդիկի առաջացրած մագնիսական դաշտի փոփոխությունները: Մոտեցման հիմնական առավելությունը կայանում է դրա կայունության մեջ, այն թույլ է տալիս ստանալ կարևոր տեղեկատվություն փորձարարական սպեկտրներից առանց լրացուցիչ սպեկտրի անհրաժեշտության:

OPTICAL MAGNETOMETRY OF INDUCED EXTRINSIC MAGNETIC FIELDS
IN HUMAN-SIZED HELMHOLTZ COILS

A.Y. TONOYAN, A.V. PAPOYAN, A.L. GOGYAN

We present simulation and analysis of the magnetic field evolution generated by human-sized copper coils when extrinsic metallic objects are introduced in their proximity. The magnetic field variation can be effectively detected by leveraging the Zeeman effect, when light interacts resonantly with alkali atoms confined in nanometric or micrometric thin cells. To precisely quantify these changes, we analyse spectra of light-atom interaction in the presence of a magnetic field and introduce an algorithm capable of measuring magnetic field variations induced by a relatively small iron sphere. The key strength of our approach lies in its robustness, as it can extract meaningful information from experimental spectra without requiring a direct reference spectrum.

ВЫРАЩИВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЛЕГИРОВАННОГО ИОНАМИ Li^+ ГРАНАТА $\text{Tm}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$

Г.Д. ХАРАТЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: gor.kharatyan@rau.am

(Поступила в редакцию 20 ноября 2025 г.)

Введение ионов Li^+ в кристаллические материалы позволяет направленно изменять их физические свойства, однако эффективность процесса определяется механизмом внедрения и компенсации заряда, который зависит от многих факторов и не всегда однозначен. В настоящем исследовании в качестве модельной системы выбран тулий алюминиевый гранат, $\text{Tm}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (TmAG). Методом Бриджмена выращены монокристаллы TmAG, TmAG:Li и TmAG:Ce,Li с концентрацией Li 50 и 150 ppm, а также синтезированы поликристаллические образцы TmAG и TmAG:Li с концентрацией Li до 600 ppm с использованием методов твердофазных реакций и закалки расплава. Параметры элементарной ячейки образцов измерены и сопоставлены с расчетными значениями, полученными по теоретическим моделям. Зарегистрированы спектры поглощения монокристаллов TmAG:Li и TmAG:Ce,Li до и после γ -облучения. Экспериментальные результаты показали, что по крайней мере часть ионов Li^+ занимает в TmAG узлы кристаллографической решетки, аналогично поведению ионов Li^+ в лютейций алюминиевом гранате. Предполагается, что ионы Li^+ с большей вероятностью замещают ионы Al^{3+} .

1. Введение

Неорганические материалы на основе гранатов, активированные редкоземельными ионами, широко используются в качестве сцинтилляторов для детектирования ионизирующего излучения во многих областях, включая физику высоких энергий, медицину, экологический мониторинг, геологию и астрономию, а также в лазерах [1, 2]. Создание многокомпонентных гранатов позволило путем изменения состава целенаправленно изменять ширину запрещенной зоны, а также характеристики ловушек, такие как их глубина и эффективность захвата. Применение данного подхода привело к созданию высокоэффективного сцинтиллятора $\text{Gd}_3\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}:\text{Ce}$ с рекордным световым выходом [3]. Другим эффективным методом является введение на места трехвалентных ионов матрицы двухвалентных примесей (Ca^{2+} , Mg^{2+}) с целью стабилизации состояний Ce^{4+} . При этом, в механизме сцинтилляции исключается этап захвата ионами Ce^{3+} дырки и уменьшается вероятность захвата электронов из зоны проводимости на электронных ловушках, что приводит к существенному ускорению сцинтилляции [4, 5].

Одновалентные примеси также приводят к существенным изменениям физических свойств, однако в отличие двухвалентных механизмы внедрения и компенсации заряда зависят от многих факторов и не всегда однозначны. Улучшение

световыххода и временных параметров наблюдалось в оптической керамике $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce},\text{Li}$ [6]. Улучшение временных параметров наблюдалось и в кристалле $\text{Gd}_3(\text{Ga},\text{Al})_5\text{O}_{12}:\text{Ce},\text{Li}$, однако в зависимости от концентрации Li^+ в оптических спектрах наблюдались либо полосы Ce^{4+} , либо полосы связанные с O^- центрами [7]. В работе [8] показано, что в кристалле $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce},\text{Li}$ ионы Li^+ замещают узлы решетки с компенсацией заряда за счет переходов $\text{Ce}^{3+} \rightarrow \text{Ce}^{4+}$ и создания дырочных центров O^- , а в $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce},\text{Li}$ ионы Li^+ находятся в междоузлиях и компенсация заряда происходит за счет снижения концентрации анионных вакансий. В [9] показано, что ионы Li^+ в кристалле YAG:Ce практически не изменяют концентрацию ионов Ce^{3+} , однако приводят к перераспределению дырок и электронов между дырочными O^- и электронными F^+ центрами. При малых концентрациях ионы Li^+ замещают ионы Y^{3+} , а при высоких (1 ат%) замещают также ионы Al^{3+} . Ионы Li^+ в гранате $\text{Gd}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}:\text{Ce}(\text{Pr})$ [10–13], несмотря на практически одинаковые ионные радиусы Sc^{3+} и Li^+ , занимают междоузельные пространства и существенно повышают радиационную стойкость [14, 15].

Таким образом, в зависимости от механизма внедрения, ионы Li^+ могут иметь различную функциональную роль. Несмотря на некоторые несоответствия и неполноту литературных данных, можно заключить, что механизм внедрения ионов Li^+ зависит прежде всего от его концентрации и объема элементарной ячейки основы, однако граница, разделяющая преобладание того или иного механизма, до настоящего времени не установлена. В этом контексте изучение тугиляя алюминиевого граната с ионами Li^+ представляет особый интерес, поскольку параметр его элементарной ячейки a_0 находится между параметрами ячеек $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (LuAG) ($a_0 = 11.910 \text{ \AA}$) и $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ($a_0 = 12.001 \text{ \AA}$).

TmAG относится к семейству редкоземельных алюминиевых гранатов ($\text{RE}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, $\text{Re} = \text{Y, Gd–Lu}$); структура кубическая (пр. гр. $Ia3d$), $a_0 = 11.957 \text{ \AA}$ [16]. TmAG имеет богатый инфракрасный и рамановский спектры с предсказанными 17 ИК-активными и 25 рамановскими активными колебательными модами [17]. В кристалле TmAG:Но возбуждено стимулированное излучение в импульсном режиме при 300 К на переходе $^5I_7 \rightarrow ^5I_8$ ионов Ho^{3+} ($\lambda = 2.0995 \text{ мкм}$), где в качестве сенсибилизатора выступают матричные ионы Tm^{3+} [18]. В работе [19] получена высокопрозрачная оптическая керамика TmAG ($T = 80.5\%$ на 2000 нм). Данных по легированию ионами Ce^{3+} , Li^+ , Ca^{2+} , а также о получении сцинтиляции в кристаллах на основе TmAG на сегодняшний день нет.

С целью анализа возможных механизмов внедрения в настоящей работе получена серия TmAG с ионами Li^+ , Ca^{2+} и Ce^{3+} в виде поликристаллов и монокристаллов. Проведён анализ a_0 (измеренных и расчетных) и спектров оптического поглощения, в том числе после γ -облучения.

2. Экспериментальные методы

Для синтеза поликристаллов и выращивания монокристаллов использовались оксиды Tm_2O_3 , Al_2O_3 , CeO_2 чистотой 99.99% и Li_2CO_3 , CaO чистотой 99.95%. Поликристаллические образцы гранатов TmAG:Li ($\text{Li} = 0\text{--}600 \text{ ppm}$) были синтезированы методами твердофазных реакций и закалки расплава. Для получения образцов твердофазным синтезом перемешанные исходные оксиды прессовали в таблетки и обжигали на воздухе при 1300°C в течение 12 часов. Для

полноты реакции процесс проводился повторно при тех же условиях. Для получения поликристаллов методом закалки расплава перемешанные оксиды плавили в атмосфере Ar/H₂ (10%) и после выдержки в течение 10 минут охлаждали до комнатной температуры.

Монокристаллы TmAG:Li, TmAG:Ce,Li и TmAG:Ce,Ca выращивали методом Бриджмена (вертикальная направленная кристаллизация) [20]. Номинальные концентрации примесей составляли: 0.5 ат% Ce, 0 и 125 ppm Li, и 50 ppm Ca. Кристаллизация проводилась при скоростях 1.5–2.0 мм/час в атмосфере Ar/H₂ (10%) с использованием затравок, ориентированных по оси <100>. Полученные монокристаллы имели длину 60–70 и диаметр 13 мм и зеленую окраску. Для оптических измерений были изготовлены полированные пластины толщиной 2 мм, выбранные из средних участков кристаллов.

Параметры элементарной ячейки поликристаллов и монокристаллов были измерены с точностью 1×10^{-4} Å методом рентгеновской дифракции на дифрактометре DRF-2.0 с использованием излучения CuK α . Дифракционные спектры были проанализированы на соответствие структуре граната и наличие вторичных фаз. Оптические спектры поглощения измерены на спектрофотометре Specord 200+. Облучение кристаллов проведено на кольцевом источнике γ -излучения ⁶⁰Со с энергией фотонов 1.25 МэВ, с дозой 1 кГр при скорости дозы 219.6 Гр/ч. Измерения оптических спектров выполнены в непосредственно после γ -облучения.

3. Результаты и их обсуждение

3.1. Параметр элементарной ячейки

Результаты измерений a_0 образцов TmAG:Li (Li = 0–600 ppm), полученных различными методами, а также вычисленные по эмпирической формуле [21] значения приведены в табл.1 и на рис.1. В поликристаллических образцах, полученных методом твердофазных реакций, наблюдается тенденция увеличения a_0 с повышением концентрации Li. Сравнение ионных радиусов катионов матрицы и Li⁺ в различных координациях ($r_{\text{Tm}}^{\text{VIII}} = 0.994$ Å, $r_{\text{Al}}^{\text{VI}} = 0.535$ Å, $r_{\text{Al}}^{\text{IV}} = 0.39$ Å, $r_{\text{Li}}^{\text{VIII}} = 0.92$ Å, $r_{\text{Li}}^{\text{VI}} = 0.76$ Å, $r_{\text{Li}}^{\text{IV}} = 0.59$ Å) [22] показывает, что увеличение a_0 возможно при замещении ионами Li⁺ октаэдрических или тетраэдрических узлов

Табл.1. Концентрация лития, экспериментальные и расчётные значения a_0 в поликристаллах и монокристаллах TmAG:Li

Li, ppm	Твердофазный синтез	Закалка расплава	Кристалл	Кристалл
			(эксп.)	(расчт.)
	a_0 , Å/фазы	a_0 , Å/фазы	a_0 , Å	a_0 , Å
0	11.9560/G	11.9563/G	11.9571	11.9551
125	11.9562/G	11.9570/G	11.9578	11.9573*, 11.9575**
300	11.9568/G+LiAlO ₂ (следы)	11.9570/G+LiAlO ₂		11.9606*, 11.9610**
600	11.9573/G+LiAlO ₂ (следы)	11.9570/G+LiAlO ₂		11.9660*, 11.9669**

Для замещений в октаэдрах* и тетраэдрах** (G – гранат)

решетки граната, но не додекаэдрических. При вхождении ионов Li^+ в междоузлия параметр a_0 предположительно сохраняется неизменным. При введении концентраций Li в количествах 300 и 600 ppm в образцах присутствует в следовых количествах вторичная фаза LiAlO_2 , что свидетельствует об ограниченной растворимости ионов Li^+ в структуре этого граната. Следует отметить, что коэффициент распределения Li^+ в кристаллах гранатов, выращиваемых из расплава, много меньше единицы [23]. При более быстром процессе закалки расплава количество выделенной вторичной фазы увеличивается. Расчеты a_0 по формуле [21], приведенные в табл.1, проведены с учетом замещений ионами Li^+ только октаэдрических ($x = 0, y \neq 0, z = 0$) или тетраэдрических узлов ($x = 0, y = 0, z \neq 0$).

На рис.1б представлены зависимости a_0 от концентрации Li, рассчитанные по формуле [21] для замещений в трех позициях кристаллической решетки TmAG и экспериментальные значения:

$$a = b_1 + b_2 r^{\text{VIII}} + b_3 r^{\text{VI}} + b_4 r^{\text{IV}} + b_5 r^{\text{VIII}} r^{\text{VI}} + b_6 r^{\text{VIII}} r^{\text{IV}}, \quad (1)$$

$$r^{\text{VIII}} = r_{\text{Tm}}^{\text{VIII}} + \frac{x}{3} (r_{\text{Li}}^{\text{VIII}} - r_{\text{Tm}}^{\text{VIII}}), \quad (2)$$

$$r^{\text{VI}} = r_{\text{Al}}^{\text{VI}} + \frac{y}{2} (r_{\text{Li}}^{\text{VI}} - r_{\text{Al}}^{\text{VI}}), \quad (3)$$

$$r^{\text{IV}} = r_{\text{Al}}^{\text{IV}} + \frac{z}{3} (r_{\text{Li}}^{\text{IV}} - r_{\text{Al}}^{\text{IV}}), \quad (4)$$

где $b_1 = 7.02954$; $b_2 = 3.31277$; $b_3 = 2.49398$; $b_4 = 3.34124$; $b_5 = -0.87758$; $b_6 = -1.38777$; x, y, z – доля ионов лития; $r_{\text{Tm}}^{\text{VIII}}, r_{\text{Al}}^{\text{VI}}, r_{\text{Al}}^{\text{IV}}$ – радиусы ионов матрицы; $r_{\text{Li}}^{\text{VIII}}, r_{\text{Li}}^{\text{VI}}, r_{\text{Li}}^{\text{IV}}$ – ионный радиус лития в трех координациях.

Как следует из данных табл.1 и рис.1а, в случае твердофазного синтеза параметр a_0 монотонно возрастает с увеличением концентрации примеси, тогда как при методе закалки расплава параметр a_0 увеличивается до определенной концентрации 125 ppm, а далее остается на постоянном уровне, что связано с высокой скоростью процесса и образованием вторичных фаз.

На рис.1б при наложении теоретических зависимостей видна разница между экспериментальными и расчетными данными. При малых концентрациях ионы

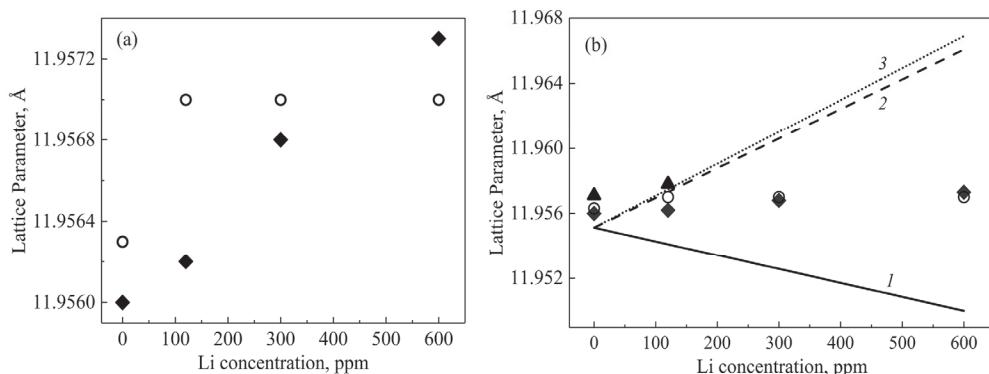


Рис.1. (а) Экспериментальные значения a_0 для поликристаллов, (б) линейные зависимости параметра решетки a_0 от концентрации ионов Li^+ , рассчитанные для замещений в трех различных узлах кристаллической решетки, (1 – в додекаэдрах ($x \neq 0, y = 0, z = 0$), 2 – октаэдрах ($x = 0, y \neq 0, z = 0$), 3 – тетраэдрах ($x = 0, y = 0, z \neq 0$)); \blacktriangle – монокристалл, \blacklozenge – твердофазный синтез, \circ – закалка).

Li^+ во всех образцах практически не замещают ионы Tm^{3+} , а частично замещают ионы Al^{3+} . При высоких концентрациях различие между экспериментальными и расчетными значениями увеличивается, что в первую очередь следует отнести к выпадению фазы LiAlO_2 , не исключая при этом одновременное замещение додекаэдрических узлов.

Из рис.1b также видно, что для нелегированных образцов параметр a_0 монокристаллов больше, чем у поликристаллов. Это различие для твердофазных образцов составляет 0.0011 Å, что можно отнести к образованию в монокристаллах неэквивалентных замещений, антисайт-дефектов $\text{Tm}_{\text{Al(VI)}}$ (крупные ионы Tm^{3+} на местах Al^{3+} в октаэдрах), которые образуются в редкоземельных гранатах при выращивании из высокотемпературных расплавов [24]. В предположении, что различие в параметрах a_0 обусловлено только этим фактором, рассчитана концентрация антисайт-дефектов $\text{Tm}_{\text{Al(VI)}}$. Совпадение с экспериментальными данными достигается при $y = 0.0072$, то есть формулу кристалла можно записать в виде $\text{Tm}_3[\text{Tm}_{0.0072}\text{Al}_{0.99628}]_2\text{Al}_3\text{O}_{12}$. Количество антисайт-дефектов составляет 0.24%. Отметим, что в кристалле YAG число антисайт-дефектов по спектроскопическим данным [23] составляет около 1.5%, а в одной из последних работ [25] рассчитано, что 6.2% от общего количества иттербия в оптической керамике YAG:Yb (10 ат%), синтезируемой при температурах близких к температуре плавления, локализуется в октаэдрах.

3.2. Спектры поглощения

На рис.2а представлены спектры поглощения беспримесного TmAG и TmAG:Li (30 и 150 ppm). Пики на длинах волн около 262, 357 и 460 нм соответствуют переходам $^3H_6 \rightarrow ^1P_2$, $^3H_6 \rightarrow ^1D_2$, $^3H_6 \rightarrow ^1G_4$ ионов Tm^{3+} . По сравнению с беспримесным, поглощение в кристаллах с ионами Li^+ в области 200–300 нм увеличивается, что свидетельствует об увеличении дефектов и связанных с ними центров окраски. Основной вклад в поглощение в этой области дают F-центры (кислородные вакансы, захватившие электроны). Спектры указывают на то, что ионы Li^+ замещают узлы решётки с компенсацией заряда за счёт увеличения числа кислородных вакансий. Отметим, что увеличение поглощения в этой области наблюдалось в кристалле LuAG при введении ионов Li^+ , в котором ионы Li^+

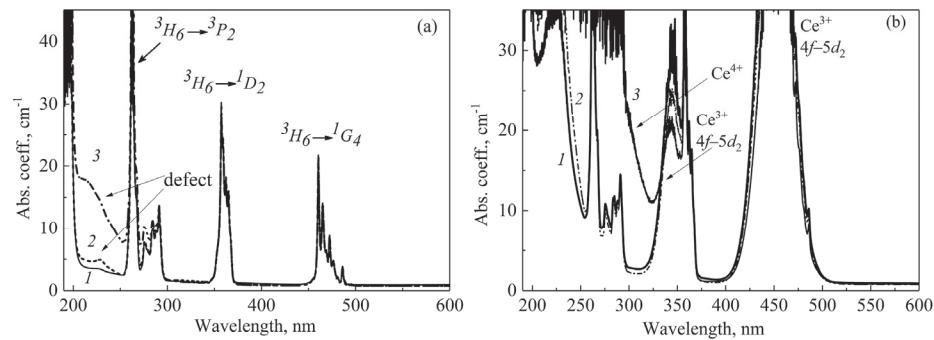


Рис.2. Спектры поглощения кристаллов (а) TmAG с концентрациями Li 0, 30 и 150 ppm (1 – TmAG, 2 – TmAG:Li 30 ppm, 3 – TmAG:Li 150 ppm), (б) TmAG:Ce с примесями ионов Li^+ (30 ppm) и Ca^{2+} (50 ppm) (1 – TmAG:Ce, 2 – TmAG:Ce, Li 30 ppm, 3 – TmAG:Ce, Ca 50 ppm).

замещают узлы решетки [11].

На рис.2б представлены спектры поглощения кристаллов TmAG:Ce, TmAG:Ce,Li и TmAG:Ce,Ca ($d = 2$ мм) при концентрации Ce, равной 0.3 ат%, и концентрациях примесей Li и Ca 30 и 50 ppm, соответственно. В области 300–500 нм на полосы поглощения Tm^{3+} накладываются полосы поглощения ионов Ce^{3+} на 340 и 450 нм (переходы $4f-5d_2$ и $4f-5d_1$). Замещение ионов Tm^{3+} ионами Ca^{2+} сопровождается компенсацией заряда за счёт переходов $\text{Ce}^{3+} \rightarrow \text{Ce}^{4+}$. Об этом свидетельствует появление широкой интенсивной полосы переноса заряда ионов Ce^{4+} в области длин волн ниже 350 нм, которая аналогична полосе, наблюдаемой и в других Ce-содержащих гранатах с двухвалентными примесями (LuAG:Ce,Mg [26], GSAG:Ce,Ca [12]). При введении ионов Li^+ в TmAG:Ce спектры изменяются незначительно, что свидетельствует о низкой эффективности переходов $\text{Ce}^{3+} \rightarrow \text{Ce}^{4+}$ при данной (30 ppm) концентрации ионов Li^+ (рис.2б).

На рис.3 представлены спектры поглощения кристаллов TmAG, TmAG:Li (30 ppm) и TmAG:Li (150 ppm) до и после γ -облучения дозой 1 кГр. γ -облучение кристалла TmAG с 30 ppm Li (рис 3б), по сравнению с беспримесным (рис.3а), приводит к увеличению поглощения в области 200–250 нм, что указывает на увеличение концентрации F-центров из-за роста кислородных вакансий и подтверждает замещение ионами Li^+ узлов решетки. При увеличении концентрации Li до 150 ppm поглощение в необлученном кристалле в области ниже 290 нм, обусловленное дефектами, резко возрастает (рис.2а и рис.3с). После γ -облучения в спектрах (рис.3с) наблюдается перераспределение интенсивностей полос поглощения (уменьшение в области 200–260 нм и увеличение в области выше 280 нм), что свидетельствует о переносе заряда между различными дефектными центрами в процессе облучения.

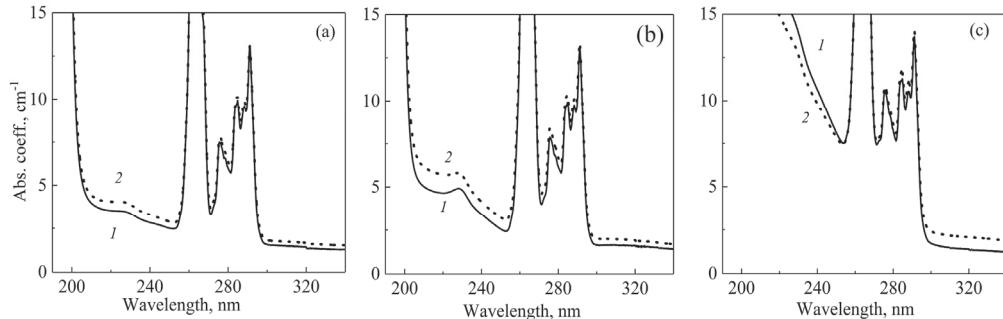


Рис.3. Спектры поглощения кристаллов (а) TmAG, (б) TmAG:Li (30 ppm) и (с) TmAG:Li (150 ppm). (1 – исходный кристалл, 2 – после γ -облучения).

4. Заключение

Для анализа механизма замещения и компенсации заряда ионов Li^+ в TmAG синтезированы поликристаллы методами твердофазных реакций и закалки расплава, а также монокристаллы с различным примесным составом (Li^+ , Ca^{2+} , Ce^{3+}) с использованием метода Бриджмена. Параметр a_0 поликристаллов TmAG:Li в области концентраций Li до 125 ppm увеличивается с концентрацией Li, указывая на замещение меньших по размеру ионов Al^{3+} . При концентрациях выше 300 ppm в поликристаллах выпадает фаза LiAlO_2 , свидетельствуя об ограниченной

растворимости Li в этой матрице. По сравнению с TmAG поглощение в спектрах кристаллов TmAG:Li в УФ области увеличивается, указывая на рост концентрации кислородных вакансий и связанных с ними F-центров. Наведенное γ -облучением поглощение в кристалле TmAG:Li (30 ppm) также выше, чем в TmAG. Эти данные подтверждают механизм замещения ионами Li^+ кристаллографических узлов решетки. По сравнению с легированием ионами $\text{Ce}^{3+}:\text{Ca}^{2+}$ спектры поглощения кристаллов TmAG:Ce,Li, показывают малую эффективность перевода ионов Ce^{3+} в состояния Ce^{4+} . Результаты исследований позволяют заключить, что граница объема элементарной ячейки гранатов, разделяющая два механизма замещения (замещение узлов и локализация в междуузлиях), лежит выше объема элементарной ячейки кристалла TmAG. Результаты могут быть учтены при анализе механизма замещения в других гранатах, например при изменении соотношения Lu/Al в твердых растворах $(\text{Lu},\text{Y})_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, имеющих важное прикладное значение.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке РА (проект 21AG-1C130).

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Dujardin, E. Auffray, E. Bourret, P. Dorenbos, P. Lecoq, M. Nikl, A.N. Vasil'ev, A. Yoshikawa, R. Zhu. IEEE Trans. Nucl. Sci., **65**, 1977 (2018).
2. A.A. Kaminskii. Laser Crystals: Their Physics and Properties. Berlin–Heidelberg, Springer–Verlag, 2013.
3. K. Kamada, S. Kurosawa, P. Prusa, M. Nikl, V.V. Kochurikhin, T. Endo, K. Tsutumi, H. Sato, Y. Yokota, K. Sugiyama, A. Yoshikawa. Optical Materials, **36**, 1942 (2014).
4. S. Blahuta, A. Bessiere, B. Viana, P. Dorenbos, V. Ouspenski. IEEE Trans. Nucl. Sci., **60**, 3134 (2013).
5. M. Nikl, K. Kamada, V. Babin, J. Pejchal, K. Pilarova, E. Mihokova, A. Beitlerova, K. Bartosiewicz, S. Kurosawa, A. Yoshikawa. Cryst. Growth Des., **14**, 4827 (2014).
6. S. Liu, X. Feng, J.A. Mares, V. Babin, C. Hu, H. Kou, C. D'Ambrosio, J. Li, Y. Pan, M. Nikl. Opt. Materials, **64**, 245 (2017).
7. S. Zazubovich, V.V. Laguta, P. Machek, K. Kamada, A. Yoshikawa, M. Nikl. J. Lumin., **242**, 118548 (2022).
8. M.V. Derdzyan, K.L. Hovhannesyan, A.V. Yeganyan, R.V. Sargsyan, A. Novikov, A.G. Petrosyan, C. Dujardin. Cryst. Eng. Comm., **20**, 1520 (2018).
9. V. Laguta, M. Buryi, V. Babin, P. Machek, S. Zazubovich, K. Bartosiewicz, S. Kurosawa, A. Yamaji, A. Yoshikawa, K. Ulic'na, V. Chlan, H. Stepankova, M. Nikl. J. Mater. Chem. C, **11**, 1346 (2023).
10. A. Kling, D. Kollewe, D. Mateika. Phys. Res. Sec. A, **20**, 205 (1994).
11. O. Zapadlik, J. Pejchal, R. Kucerkova, A. Beitlerová, M. Nikl. Cryst. Growth Des., **21**, 7139 (2021).
12. K.L. Hovhannesyan, M.V. Derdzyan, G. Badalyan, G. Kharatyan, J. Pejchal, M. Nikl, C. Dujardin, A.G. Petrosyan. Cryst. Eng. Comm., **26**, 4812 (2024).
13. Т.И. Бутаева, А.В. Еганин. Известия НАН Армении, Физика, **60**, 268 (2025).
14. K.L. Hovhannesyan, M.V. Derdzyan, I.A. Ghambaryan, T.I. Butaeva, C. Dujardin, A.G. Petrosyan. Phys. Stat. Sol. (a), **220**, 2300386 (2023).

15. **M.V. Derdzyan, K.L. Hovhannesyan, I.A. Ghambaryan, G. Kharatyan, C. Dujardin, A.G. Petrosyan.** IEEE Trans. Nucl. Sci., **72**, 1988 (2025).
16. **А.Г. Петросян, Г.О. Ширинян.** Неорганические Материалы, **29**, 258 (1991).
17. **K. Papagelis, G. Kanellis, T. Zorba, S. Ves, G.A. Kourouklis.** J. Physics: Condensed Matter, **14**, 915 (2002).
18. **A.A. Kaminskii, A.G. Petrosyan, B.A. Fedorov, V.V. Ryabchenkov, A.A. Pavlyuk, V.V. Ljubchenko, A.V. Lukin.** Inorganic Materials, **17**, 1430 (1981).
19. **W.X. Zhang, J. Li, W.B. Liu, Y.B. Pan, J.K. Guo.** Ceramics International, **35**, 2927 (2009).
20. **A.A. Chernov, E.I. Givargizov, K.S. Bagdasarov, V.A. Kuznetsov, L.N. Demianets, A.N. Lobachev.** Modern Crystallography III: Crystal Growth, Berlin–Heidelberg–New York–Tokyo, Springer–Verlag, 1984.
21. **B. Strocka, P. Holst, W. Tolksdorf.** Philips J. Res., **33**, 166 (1978).
22. **R.D. Shannon.** Found. Crystallography, **32**, 751 (1976).
23. **M. Yoshino, K. Bartosiewicz, T. Horiai, K. Kamada, A. Yamaji, Y. Shoji, Y. Yokota, S. Kurosawa, Y. Ohashi, H. Sato, S. Toyoda, R. Kucerkova, V. Jary, M. Nikl, A. Yoshikawa.** Phys. Stat. Sol. (b), **257**, 1900504 (2020).
24. **M.K. Ashurov, Y. Voronko, V.V. Osiko, A.A. Sobol, M.I. Timoshechkin.** Phys. Stat. Sol. (a), **42**, 101 (1977).
25. **G. Demirkhanyan, B. Patrizi, G. Toci, M. Vannini, J. Li, A. Pirri, R. Kostanyan, Y. Feng, T. Xie, L. Wu, D. Zargaryan, P. Muzhikyan.** J. Sol. St. Chem., **316**, 123577 (2022).
26. **M. Nikl, K. Kamada, V. Babin, J. Pejchal, K. Pilarova, E. Mihokova, A. Beitlerova, K. Bartosiewicz, S. Kurosawa, A. Yoshikawa.** Cryst. Growth Des., **14**, 4827 (2014).

GROWTH AND INVESTIGATION OF $\text{Tm}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ GARNET DOPED WITH Li^+ IONS

G.TS. KHARATYAN

Incorporation of Li^+ ions into crystalline materials enables controlled modification of their physical properties; however, the efficiency of this process is determined by the mechanism of incorporation and charge compensation, which depends on many factors and is not always straightforward. In the present study, thulium aluminum garnet $\text{Tm}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (TmAG) was chosen as a model system. Single crystals of TmAG, TmAG:Li, and TmAG:Ce,Li with Li concentrations of 50 and 150 ppm were grown by the Bridgman method, and polycrystalline samples of TmAG and TmAG:Li with Li concentrations up to 600 ppm were synthesized using solid-state reaction and melt-quenching techniques. The unit cell parameters of the samples were measured and compared with calculated values obtained from theoretical models. Absorption spectra of TmAG:Li and TmAG:Ce,Li single crystals were recorded before and after γ -irradiation. Experimental results have shown that at least a portion of the Li^+ ions in TmAG occupy crystallographic lattice sites, like the behavior of Li^+ ions in lutetium aluminum garnet. It is suggested that Li^+ ions are most likely to replace Al^{3+} ions.

Известия НАН Армении, Физика, т.60, №4, с.513–519 (2025)

УДК 538.911

DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.4-513

ВЛИЯНИЕ СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РАШБЫ НА ПОДВИЖНОСТЬ ЭЛЕКТРОНОВ В НАНОПРОВОЛОКАХ GaN ПРИ РАССЕЯНИИ НА АКУСТИЧЕСКИХ ФОНОНАХ

А. ВАРТАНЯН¹, А. АСАТРЯН^{1*}, М. ЕРАНОСЯН^{1,2}, А. СТЕПАНЯН¹,
Г. ХАЧАТРЯН¹, С. АЙРАПЕТЯН¹, Ү.-Н. ХІЕ³

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Институт химической физики им. А.Б. Налбандяна НАН РА, Ереван, Армения

³University of California, Los Angeles, California, USA

*e-mail: annaa@ysu.am

(Поступила в редакцию 5 ноября 2025 г.)

Исследована подвижность электронов при рассеянии на акустических фонах в цилиндрической полупроводниковой нанопроволоке GaN, помещенной в неполярную среду. С учетом спин-орбитального взаимодействия получены зависимости подвижности электронов от радиуса нанопроволоки, линейной концентрации электронов, параметра спин-орбитального взаимодействия Рашбы и температуры. Показано, что учет спин-орбитального взаимодействия приводит к росту подвижности электронов, причем скорость роста высока при низких температурах. Рассмотрен важный технологический вопрос о влиянии спин-орбитального взаимодействия на подвижность электронов в квазиодномерных транспортных устройствах на основе нанопроволок GaN в области низких температур, где доминирует рассеяние на акустических фонах.

1. Введение

В последнее время нанопроволоки GaN находят всё большее применение в квантовой электронике. Это малотоксичные широкозонные полупроводники с высокой подвижностью электронов, что делает их незаменимыми для электронного транспорта вnanoструктурных устройствах. Обладая широкой (3.4 эВ) запрещённой зоной и уникальными физическими и оптическими свойствами, нанопроволоки GaN с успехом применяются в высокоскоростных, мощных и высокочастотных электронных и фотоэлектрических устройствах в условиях высоких температур. Так, широкозонные полупроводники являются важнейшими материалами для создания источников излучения синего света и лазеров [1]. Нанопроволоки GaN обладают одномерной структурой, обеспечивающей их превосходную кристалличность, вследствие чего они демонстрируют замечательную химическую активность, размерно-квантовые эффекты при диаметрах образцов порядка и менее 10–15 нм [2], свойства самоорганизации и снятия напряжений [3], благодаря большой удельной площади поверхности нанопроволоки. В последние годы полупроводниковые нанопроволоки привлекают все большее внимание ввиду их массовых применений в лазерах [4], светодиодах [5],

фотодетекторах [6], солнечных батареях [7], полевых транзисторах [8], биоинтегрированной электронике [9] и т. д.

Спин-орбитальные взаимодействия важны для манипулирования спиновыми и зарядовыми степенями свободы в низкоразмерных и наномасштабных полупроводниковых системах, в частности, они играют существенную роль в управлении оптоэлектронными явлениями в полупроводниковых наноструктурах с целью улучшения характеристик различных устройств на их основе. Следует отметить, что среди кристаллических твердых тел спин-орбитальное взаимодействие (СОВ) особо выражено в некоторых полупроводниках [10], и хотя энергия СОВ обычно мала по сравнению с другими характерными энергиями, она, тем не менее, вызывает расщепление вырожденных энергетических зон вблизи уровня Ферми, тем самым оказывая эффективное влияние на характеристики микро- и наноэлектронных устройств. Спин-орбитальное взаимодействие напрямую влияет на транспортные явления в наноструктурах, которые, в свою очередь, могут быть использованы для оценки СОВ. Это, в частности, относится к магнитопроводимости низкоразмерных систем. Известно, что ее измерения косвенно дают информацию о СОВ, поскольку проводимость увеличивается при сильном СОВ из-за спиновой релаксации по сравнению со случаями, когда СОВ слабое или вовсе отсутствует [11].

В зависимости от происхождения СОВ обычно различают эффект Рашбы, индуцированный структурно-инверсионной асимметрией [12], и эффект Дрессельхауса, индуцированный объемно-инверсионной асимметрией [13]. По сравнению с СОВ Дрессельхауса, СОВ Рашбы привлекло больший интерес, поскольку его можно адаптировать к различным типам асимметрии низкоразмерных структур, таким как асимметрично-легированные квантовые структуры, не-эквивалентные нормальные и инвертированные интерфейсы, асимметричные квантовые ямы и внешние или встроенные электрические поля [14]. Было обнаружено, что СОВ Дрессельхауса, индуцированное объемно-инверсионной асимметрией, важно, особенно в низкоразмерных квантовых структурах, и поскольку в гетероструктурах на основе GaN оно слабее СОВ Рашбы экспериментальное измерение коэффициента СОВ Дрессельхауса затруднено [15].

Другим фактором, влияющим на оптоэлектронные и динамические характеристики наноструктур, является рассеяние носителей заряда. В данной работе изучено влияние спин-орбитального взаимодействия на подвижность при рассеянии электронов на акустических фонах в нанопроволоках GaN при различных значениях параметров спин-орбитального взаимодействия, плотности электронов, радиуса нанопроволоки, и в широком диапазоне температур.

2. Теория

Механизмы рассеяния, ограничивающие подвижность электронов в полупроводниковых гетероструктурах в слабых электрических полях, можно моделировать в приближении времени релаксации импульса, когда энергия фона значительно меньше средней энергии электрона. Именно такая ситуация имеет место в случае акустических фонаров, что является следствием их линейной дисперсии в длинноволновом пределе.

Рассмотрена ограниченная акустическими фонарами подвижность

электронов в нанопроволоке длиной L и радиусом r_0 , с использованием формулы Кубо–Гринвуда [16], адаптированной для одномерного транспорта [17], которая в однодолинном полупроводнике имеет вид:

$$\mu(n_L, T, \alpha, \beta) = \frac{2e}{k_B T m^* n_L} \times \sum_{nm\zeta} \int_{E_{nm}}^{\infty} dE g_{nm}(E) \left(E + \frac{\zeta \sqrt{m^* E}}{\hbar} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} - E_{nm} \right) \tau_{nm\zeta}(E) f(E) [1 - f(E)], \quad (1)$$

где k_B – постоянная Больцмана, m^* – эффективная масса электрона, T – температура, n_L – линейная концентрация электронов, α и β – параметры Рашибы и Дрессельхауса, соответственно, $\tau_{nm\zeta}(E)$ – время релаксации импульса электрона, $\zeta = 1$ и $\zeta = -1$ для спиновых состояний $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$, соответственно, $f(E) = [\exp((E_{nm} + E + \zeta \hbar^{-1} \sqrt{m^* E (\alpha^2 + \beta^2)} - \eta)/k_B T) + 1]^{-1}$ – функция распределения Ферми–Дирака, η – химический потенциал, $g_{nm}(E) = 2[\pi^2(\alpha^2 + \beta^2 + 2\hbar^2(E - E_{nm})/m^*)]^{-1/2}$ – одномерная плотность состояний в подзоне $(nm\zeta)$ нанопроволоки, $E_{nm} = \hbar\omega_0(2n + |m| + 1)$ – энергия квантования в сечении нанопроволоки, ω_0 – частота параболического потенциала, ограничивающего поперечное движение электрона в нанопроволоке, $n = 0, 1, 2, \dots$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ – квантовые числа. Связь между ω_0 и радиусом нанопроволоки дается выражением $r_0 = (\hbar/m^* \omega_0)^{1/2}$.

3. Численные результаты и обсуждение

Для расчёта подвижности электронов в нанопроволоке GaN необходимо из условия нормировки

$$n_L = \frac{N}{L} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left[f\left(\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + k\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\right) + f\left(\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - k\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\right) \right] dk. \quad (2)$$

определить химический потенциал системы, зависящий от радиуса нанопроволоки, линейной концентрации электронов, констант Рашибы и Дрессельхауса, а также температуры. Параметр Дрессельхауса $\beta = \gamma_D \pi^2 / r_0^2$, где $\gamma_D = 0.4 \text{ eV}\text{\AA}^3$. Следует отметить, что при слабом возбуждении электронной системы, GaN считается однодолинным полупроводником, так как минимум зоны проводимости находится в центре зоны Брилюэна (в точке Γ), и именно эта долина является основной.

На рис.1 представлена зависимость химического потенциала нанопроволоки GaN от температуры (рис.1a), линейной концентрации электронов (рис.1b), радиуса нанопроволоки (рис.1c) и параметра СОВ Рашибы (рис.1d) при фиксированных значениях остальных параметров. Зависимости химического потенциала от температуры, радиуса нанопроволоки и параметра Рашибы исследовались при постоянной концентрации электронов. В этом случае предполагается, что доноры полностью ионизированы при рассматриваемых температурах.

Увеличение радиуса нанопроволоки приводит к уменьшению энергии электронов, что требует уменьшения химического потенциала для поддержания среднего числа электронов в данной подзоне практически постоянным (рис.1c). Аналогичным образом объясняется уменьшение химического потенциала с ростом температуры (рис.1a). Химический потенциал растёт с ростом концентрации электронов при определённых значениях радиуса нанопроволоки,

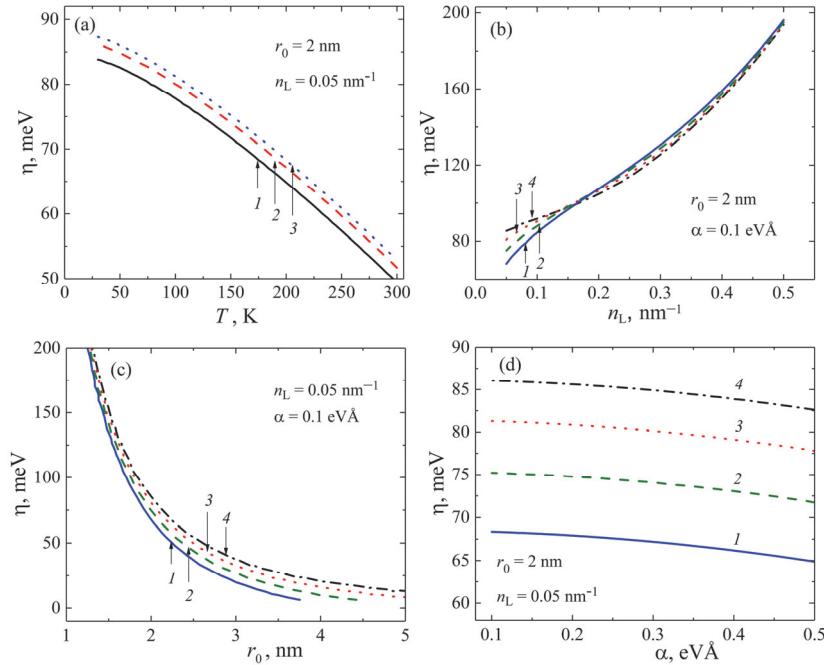


Рис.1. Зависимости химического потенциала η нанопроволоки GaN от (а) температуры T при (1) $\alpha = 0.5$, (2) $\alpha = 0.3$, (3) $\alpha = 0.1 \text{ eV}\text{\AA}$; (б) линейной концентрации электронов n_L , (с) радиуса нанопроволоки r_0 и (д) параметра СОВ Рашбы α , при (1) 200, (2) 150, (3) 100, (4) 50 К.

температуры и параметра Рашбы, поскольку при постоянных энергии квантового ограничения и температуре увеличение концентрации приводит к росту химического потенциала согласно уравнению (2) (рис.1б). При этом, скорость роста химического потенциала увеличивается с ростом температуры. Поведение химического потенциала в зависимости от параметра Рашбы (рис.1д), как видно из уравнения (2), моделируется балансировкой двух слагаемых функций распределения Ферми–Дирака. В результате наблюдается слабая зависимость (уменьшение) химического потенциала с ростом параметра Рашбы.

Зависимости подвижности электронов от различных параметров системы показаны на рис.2. С увеличением радиуса нанопроволоки GaN подвижность электронов увеличивается (рис.2а). Такая зависимость экспериментально наблюдалась при малых значениях радиуса нанопроволоки GaN [18]. СОВ Рашбы практически не влияет на подвижность электронов, когда энергия размерного квантования значительно больше энергии СОВ. При больших радиусах наблюдается значительный рост подвижности из-за СОВ (рис.2б). Более того, обусловленное СОВ повышение подвижности становится более выраженным при увеличении радиуса нанопроволоки. С повышением температуры наблюдается уменьшение подвижности электронов, обусловленное ростом среднего числа акустических фононов (рис.2с). Следует отметить, что влияние СОВ на подвижность электронов проявляется преимущественно при низких температурах, когда энергия акустических фононов становится соизмеримой с энергией СОВ. Увеличение электронной плотности в нанопроволоке приводит к росту

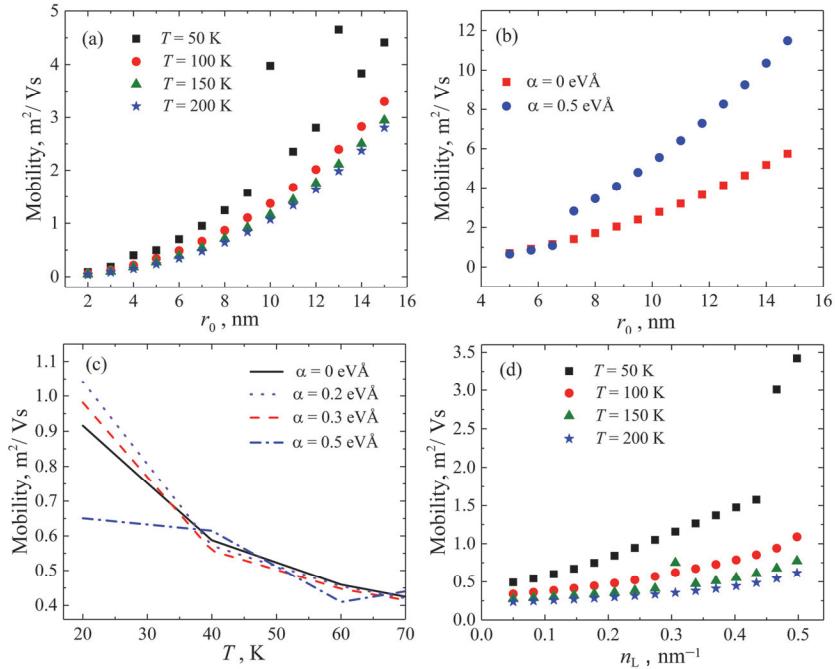


Рис.2. Зависимости подвижности электронов μ в нанопроволоке GaN при $n_L = 0.05 \text{ нм}^{-1}$ от радиуса нанопроволоки r_0 для (а) $\alpha = 0.3 \text{ eV}\text{\AA}$, (б) $T = 50 \text{ K}$, (с) от температуры T , (д) от линейной концентрации электронов $n_L(r_0 = 18 \text{ нм}, \alpha = 0.3 \text{ eV}\text{\AA})$.

подвижности электронов при рассеянии на акустических фононах (рис.2д). Это связано с тем, что повышение плотности сопровождается увеличением их средней энергии (энергии Ферми). В высокоэнергетических состояниях эффективность рассеяния на акустических фононах заметно снижается, поскольку взаимодействие электронов с низкоэнергетическими фононами становится относительно слабым, что способствует увеличению подвижности носителей заряда.

Полученные результаты открывают существенную возможность для технологических приложений. Характеристики устройств на основе наноструктур, в частности их быстродействие, главным образом определяется подвижностью носителей заряда в активных областях этих устройств. Поэтому управление электронной подвижностью и, следовательно, электропроводностью нанопроволок GaN посредством СОВ делает их перспективными для использования в наноэлектронных и спинтронных приборах.

4. Заключение

Проведен теоретический анализ влияния спин-орбитального взаимодействия на подвижность электронов в нанопроволоках GaN. Численные результаты расчета подвижности в зависимости от температуры, радиуса нанопроволоки, силы спин-орбитальной связи и линейной концентрации электронов приводят к заключению, что подвижность электронов увеличивается как с увеличением радиуса нанопроволоки, так и с увеличением концентрации

электронов. Полученные результаты показывают, что спин-орбитальное взаимодействие существенно изменяет подвижность электронов при более низких температурах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке Министерства образования, науки, культуры и спорта Республики Армения в рамках проектов № 21AG-1C048 и № 24WS-1C040.

Авторы данной работы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **H.A.A. Abdul Amir, M.A. Fakhri, A.A. Alwahib.** Mater. Today: Proc., **42**, 2815 (2021).
2. **F. Qian, J. Li, S. Gradečak, D. Wang, C.J. Barrelet, C.M. Lieber.** Nano Lett., **4**, 1975 (2004).
3. **T. Kuykendall, P. Ulrich, S. Aloni, P. Yang.** Nat. Mater., **6**, 951 (2007).
4. **A.B. Greytak, C.J. Barrelet, Y. Li, C.M. Lieber.** Appl. Phys. Lett., **87**, 151103 (2005).
5. **X. Dai, A. Messanvi, H. Zhang, C. Durand, J. Eymery, C. Bougerol, F.H. Julien, M. Tchernycheva.** Nano Lett., **15**, 6958 (2015).
6. **X. Dai, S. Zhang, Z. Wang, G. Adamo, H. Liu, Y. Huang, C. Couteau, C. Soci.** Nano Lett., **14**, 2688 (2014).
7. **P. Krogstrup, H.I. Jørgensen, M. Heiss, O. Demichel, J.V. Holm, M. Aagesen, J. Nygård, A.F. i Morral.** Nat. Photonics, **7**, 306 (2013).
8. **J. Xiang, W. Lu, Y. Hu, Y. Wu, H. Yan, C.M. Lieber.** Nature, **441**, 489 (2006).
9. **N.-K. Nguyen, T. Nguyen, T.-K. Nguyen, S. Yadav, T. Dinh, M.K. Masud, P. Singha, T.N. Do, M.J. Barton, H.T. Ta, N. Kashaninejad, C.H. Ooi, N.-T. Nguyen, H.-P. Phan.** ACS Appl. Electron. Mater., **3**, 1959 (2021).
10. **Y. Bychkov, E.I. Rashba.** JETP Lett., **39**, 78 (1984).
11. **G. Dresselhaus.** Phys. Rev., **100**, 580 (1955).
12. **L. Zhu, Y. Zhang, P. Lin, Y. Wang, L. Yang, L. Chen, L. Wang, B. Chen, Z.L. Wang.** ACS Nano, **12**, 1811 (2018).
13. **C. Yin, B. Shen, Q. Zhang, F. Xu, N. Tang, L. Cen, X. Wang, Y. Chen, J. Yu.** Appl. Phys. Lett., **97**, 181904 (2010).
14. **R. Winkler.** Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems. Springer, Berlin, Heidelberg, 2003.
15. **M. Kammermeier, P. Wenk, J. Schliemann.** Phys. Rev. B, **93**, 205306 (2016).
16. **R. Kubo.** J. Phys. Soc. Jpn., **12**, 570 (1958); **D.A. Greenwood.** Proc. Phys. Soc. London, **71**, 585 (1958).
17. **R. Kotlyar, B. Obradovic, P. Matagne, M. Stettler, M.D. Giles.** Appl. Phys. Lett., **84**, 5270 (2004).
18. **A. Motayed, M. Vaudin, A.V. Davydov, J. Melngailis, M. He, S.N. Mohammad.** Appl. Phys. Lett., **90**, 043104 (2007).

ՌԱՇԲԱՅԻ ՍՊԻՆ-ՌԵՇՐԱՅԻՆ ՓՈԽԱԶԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ՆԵՐԳՈՐԾՈՒԹՅՈՒՆԸ
ԷԼԵԿՏՐՈՆՆԵՐԻ ՇԱՐԺՈՒՄՈՒԹՅԱՆ ՎՐԱ GaN ՆԱՆՈԼԱՐԵՐՈՒՄ ԶԱՅՆԱՅԻՆ
ՖՈՆՈՆՆԵՐԻ ՎՐԱ ՑՐՄԱՆ ԴԵՊՔՈՒՄ

Ա. ՎԱՐԴԱՅԱՆ, Ա. ԱՍԱՏՐՅԱՆ, Մ. ԵՐԱՆՈՍՅԱՆ, Ա. ՍՏԵՓԱՆՅԱՆ,
Գ. ԽԱՇԱՏՐՅԱՆ, Ս. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ, Յ.-Հ. XIE

Ուսումնասիրվել է էլեկտրոնների շարժունությունը ոչ քսեռային միջավայրում ներդրված զլանային GaN կիսահաղորդչային նանոլարում՝ ձայնային ֆոնոնների վրա ցրման դեպքում: Սպին-ուղեծրային փոխազդեցության հաշվառմամբ ստացվել են էլեկտրոնային շարժունության կախումները նանոլարի շառավղից, էլեկտրոնների գծային կոնցենտրացիայից, նաշբայի սպին-ուղեծրային փոխազդեցության պարամետրից և ջերմաստիճանից: Ցույց է տրվել որ սպին-ուղեծրային փոխազդեցության հաշվառումը հանգեցնում է էլեկտրոնների շարժունության աճի, ընդ որում՝ աճի արագությունը մեծ է ցածր ջերմաստիճաններում: Դիտարկվել է կարևոր տեխնոլոգիական հարց սպին-ուղեծրային փոխազդեցության ներգործությունը էլեկտրոնային շարժունության վրա GaN նանոլարային հենքով քվազիմիաշափ տրանսպորտային սարքերում՝ ցածր ջերմաստիճաններում, եթե գերակայող է ձայնային ֆոնոնների վրա ցրումը:

IMPACT OF RASHBA SPIN-ORBIT INTERACTION ON ELECTRON MOBILITY IN
GaN NANOWIRES DUE TO SCATTERING BY ACOUSTIC PHONONS

A. VARTANIAN, A. ASATRYAN, M. YERANOSYAN, A. STEPANYAN,
G. KHACHATRYAN, S. HAYRAPETYAN, Y.-H. XIE

The electron mobility due to scattering by acoustic phonons has been studied in a cylindrical GaN semiconductor nanowire embedded in a nonpolar medium. Taking into account the spin-orbit interaction, the dependences of electron mobility on the nanowire radius, the linear electron concentration, the Rashba spin-orbit coupling parameter, and the temperature have been obtained. It is shown that inclusion of spin-orbit interaction leads to an increase in electron mobility, with the rate of increase being especially high at low temperatures. A significant technological issue is examined: the impact of spin-orbit interaction on electron mobility in quasi-one-dimensional transport devices based on GaN nanowires at low temperatures, where scattering by acoustic phonons is dominant.

Известия НАН Армении, Физика, т.60, №4, с.520–527 (2025)

УДК 535.15

DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.4-520

СЕКЦИОНИРОВАННОЕ УСТРОЙСТВО СО СВЕРХБОЛЬШОЙ ЗОНОЙ НАБЛЮДЕНИЯ ДЛЯ ОБНАРУЖЕНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ МЕСТОПОЛОЖЕНИЯ ЛЮДЕЙ

А.Е. МАРТИРОСЯН¹, П.Г. МУЖИКЯН^{1*},
В.А. МАРТИРОСЯН², Р.Б. КОСТАНЯН¹

¹Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

²Paris-Saclay University, Orsay, France

*e-mail: pmuzhikyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 16 октября 2025 г.)

Представлено устройство для обнаружения и определения местоположения людей на большом расстоянии в тепловом инфракрасном диапазоне со сверхбольшой зоной наблюдения. Устройство состоит из восьми конических рупорных элементов и соответствующих тепловых датчиков. Взаимное расположение этих элементов таково, что углы обзора соседних элементов частично перекрываются. Теоретическое рассмотрение вопроса позволило найти наиболее подходящее решение для углов наклона между соседними рупорными элементами, при котором температурный профиль угловой регистрации объектов практически равномерно распределяется по углам при общем обзоре 110°. Это дало возможность оптимальным образом спроектировать расположение рупорных элементов в устройстве с точки зрения обнаружения и нахождения местоположения людей с дальностью обнаружения до 30 м и зоной наблюдения по горизонтали до 863.9 м². Уровень суммы тепловых сигналов от двух соседних датчиков позволяет оценить расстояние до человека, а их отношение определяет угол наблюдения.

1. Введение

Системы обнаружения объектов в тепловом инфракрасном диапазоне играют важную роль в устройствах ночного видения, безопасности, наблюдения людей и объектов. Изучению различных аспектов обнаружения человека с помощью тепловых датчиков или систем датчиков посвящено множество работ. В работе [1] представлена система обнаружения движения человека на основе пассивных инфракрасных датчиков (PIR) и методов машинного обучения для определения расстояния до него, направления и скорости движения. В [2] проводятся эксперименты по регистрации аналогового выходного сигнала датчика, соответствующего перемещению объекта через поле зрения датчика на разных расстояниях. Модели распознавания местоположения и активности человека с использованием пассивных инфракрасных датчиков и алгоритмов машинного обучения разработаны в [3]. В работе [4] продемонстрирована система, настроенная на оценку количества людей в различных временных интервалах. Используя аналоговые данные и искусственную нейронную сеть [5], замкнутое пространство классифицируется по количеству людей. Разработан PIR датчик с

вращающимся затвором для обнаружения и локализации присутствия людей [6]. В работе [7] наблюдаются маршруты передвижения пожилых людей в умном доме с использованием датчиков PIR. Установив систему, описанную в [8], пожилые люди могут определять скорость своей ходьбы, ведя повседневную жизнь. Датчики PIR оценивают здоровье людей, оценивая частоту сердечных сокращений в состоянии покоя [9], и обнаруживают эпилептические приступы в режиме реального времени [10]. В обзоре [11] подробно рассматривается применение различных методов, алгоритмов машинного обучения и конфигураций пассивных инфракрасных датчиков в среде умных зданий. Разработанные на сегодняшний день приборы на основе PIR техники могут работать как самостоятельно [12–14], так и вместе с видеосистемами наблюдения [15, 16]. Аналитическое исследование зависимостей усиления и угла обзора конических рупорных элементов от параметров конструкции проведено в [17, 18]. Возможности использования рупорных элементов с коническими и эллиптическими апертурами для обнаружения людей на больших расстояниях в тепловых инфракрасных системах описаны в работах [19–21].

В настоящей работе представлено устройство для обнаружения и определения местоположения людей, которое состоит из восьми рупорных элементов с соответствующими тепловыми датчиками. Рассмотренная конструкция обеспечивает сверхбольшую зону наблюдения по горизонтали, составляющую 863.9 м^2 .

2. Методы

Как показано в работах [19, 20], использование тепловых инфракрасных датчиков с коническими рупорными элементами для концентрации излучения существенно увеличивает дальность наблюдения и поле зрения системы для обнаружения людей. Для наглядности на рис.1 представлена общая схема для определения местоположения человека с использованием трех рупорных элементов и датчиков, расположенных под углом γ относительно соседнего элемента в горизонтальной плоскости. Для исключения ненаблюдаемых зон угловой наклон между соседними парами выбирается так, чтобы их углы обзора частично перекрывались. Жирными линиями (без стрелок) обозначены границы поля зрения рупорных элементов, а пунктирными линиями – их оси. Рассмотрим случай, ко-

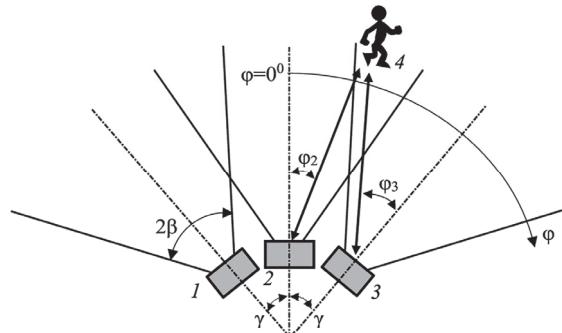


Рис.1. Схематическое изображение системы регистрации: 1, 2 и 3 – местоположение пар рупорных элементов и датчиков, 4 – наблюдаемый объект, 2β – угол обзора рупорного элемента.

гда объект находится одновременно в поле зрения двух соседних рупорных элементов, например 2-го и 3-го. На рис.1 жирными линиями со стрелками указаны направления обнаружения объекта этими элементами, φ_2 и φ_3 – соответствующие углы наблюдения относительно их осей, а φ – координата углового наблюдения в горизонтальной плоскости с центром на оси системы с тремя парами рупорных элементов и датчиков.

Рассмотрим систему наблюдения за объектом в координатах (φ, T) (рис.2), где T характеризует угловые профили температурных сигналов от датчиков 1–3 при наблюдении за объектом на постоянном расстоянии. Предложена математическая модель, когда сумма сигналов от соседних датчиков, одновременно регистрирующих объект при различных φ , практически не меняется. Представим угловую чувствительность регистрации температурного сигнала для пар рупорных элементов и датчиков в виде гауссовского распределения с угловой полушириной β , которая характеризует угол обзора рупорного элемента. Такой подход применим, исходя из хорошего соответствия результатов эксперимента по углу обзора [20] и профиля усиления [18] соответствующего рупорного элемента с расчетными данными гауссовского распределения (см. рис.3). Исходя из этого, для пар 2 и 3, наблюдающих объект (рис.1), угловые профили регистрируемых температурных сигналов от него могут быть представлены в виде:

$$T_2 = T_0 \exp\left[-\frac{\varphi^2}{2\beta^2}\right], \quad (1)$$

$$T_3 = T_0 \exp\left[-\frac{(\varphi-\gamma)^2}{2\beta^2}\right], \quad (2)$$

где T_0 – максимальный уровень температурного сигнала датчика при нахождении объекта на оси соответствующего рупорного элемента. Угол наклона γ между соседними парами можно выбрать таким образом, чтобы профили температурных сигналов для пар 2 и 3 пересекались на уровне полувысоты от максимального сигнала – $T_0/2$ (см. рис.2). Тогда из уравнения (1) для 2-ой пары получаем:

$$T_0/2 = T_0 \exp\left[-\frac{(\gamma/2)^2}{2\beta^2}\right]. \quad (3)$$

Отсюда выводим γ :

$$\gamma = -2\beta \sqrt{2 \ln \frac{1}{2}} = 2\beta \sqrt{2 \ln 2}. \quad (4)$$

Подставляя γ в уравнение (2), находим нормированную сумму $k = (T_2 + T_3)/T_0$ сигналов температуры от соседних датчиков 2 и 3:

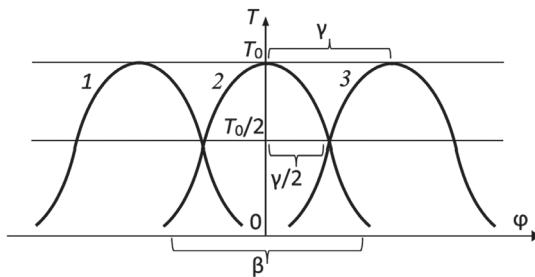


Рис.2. Профили угловой чувствительности датчиков 1–3, где T_0 – уровень максимального температурного сигнала, когда объект находится на оси одного из рупорных элементов, φ – угловая координата.

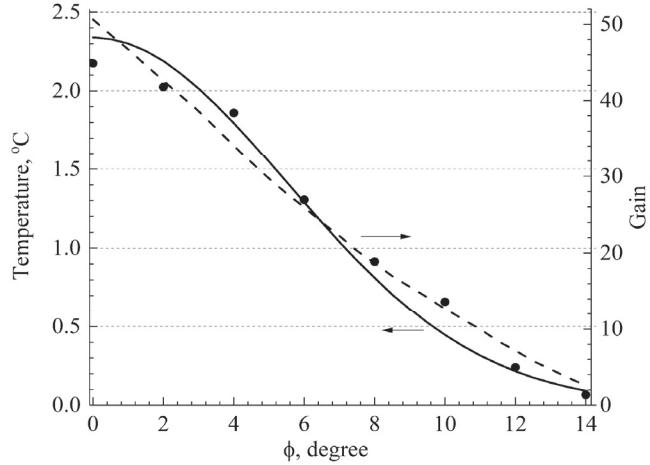


Рис.3. Зависимость температурного выходного сигнала датчика при расстоянии 6 м от человека от угла наблюдения ϕ рупорного элемента с углом у вершины 16° (кружки) [20] и соответствующего гауссовского распределения при $\beta = 5.5^\circ$ и $T_0 = 2.34$ (сплошная кривая). Пунктирная кривая показывает профиль усиления рупорного элемента (шкала справа) с углом у вершины 16° от угла наблюдения по расчетам от [18].

$$k = \left\{ \exp\left[-\frac{\varphi^2}{2\beta^2}\right] + \exp\left[-\frac{(\varphi-2\sqrt{2\ln 2})^2}{2\beta^2}\right] \right\}. \quad (5)$$

На рис.4а показано распределение суммы k от ϕ в угловом интервале $0-\gamma$. Мы можем констатировать, что эта сумма относительно стабильна и варьирует в пределах $\pm 4\%$ по сравнению со средним значением 1.04. Таким образом, исходя из закона обратной пропорциональности уровня сигнала от квадрата расстояния до объекта температурная величина суммы сигналов $kT_0 = T_2 + T_3$ может использоваться для оценки расстояния до объекта при произвольном угле наблюдения ϕ в угловом интервале $0-\gamma$.

С другой стороны, мы можем воспользоваться отношением этих сигналов $j = T_2/T_3$ для определения угла наблюдения ϕ в зависимости от этого отношения. Разделив уравнение (1) на уравнение (2), находим

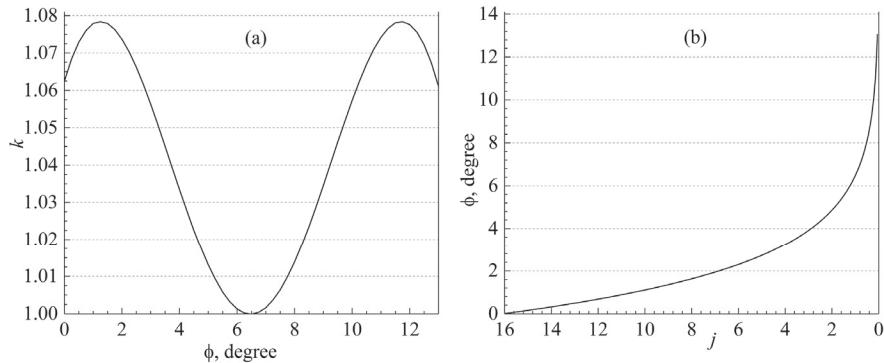


Рис.4. (а) Аналитический профиль нормированной суммы k сигналов температуры соседних пар (с углом у вершин рупорных элементов 16°) по ϕ в угловом интервале $0-\gamma$ при $\beta = 5.5^\circ$. (б) Аналитический профиль ϕ в зависимости от j при угле у вершин элементов 16° и $\beta = 5.5^\circ$.

$$j = \exp \left[\frac{-\varphi^2 + (\varphi - \gamma)^2}{2\beta^2} \right] = \exp \left[\frac{\gamma^2 - 2\gamma\varphi}{2\beta^2} \right]. \quad (6)$$

После преобразования уравнения (6) получаем формулу распределения φ в зависимости от j :

$$\varphi = \frac{\gamma}{2} - \frac{\beta^2}{\gamma} \ln j, \quad (7)$$

Подставляя γ из уравнения (4) в уравнение (7), окончательно находим

$$\varphi = \beta \sqrt{2 \ln 2} - \frac{\beta}{2\sqrt{2 \ln 2}} \ln j, \quad (8)$$

На рис.4b приведена зависимость φ от j для рупорных элементов, используемых в системе. Очевидно, что полученные результаты можно применить к любым соседним рупорным элементам в устройстве. Эти данные легли в основу конструкции и работы секционированного устройства для обнаружения и определения местоположения людей.

3. Конструкция секционированного устройства и обсуждение его характеристик

Горизонтальное расположение восьми конических рупорных элементов в устройстве показано на рис.5а, где серым цветом обозначены модули тепловых датчиков MLX90614. Угол при вершине и длина каждого элемента составляют 16° и 90 мм, соответственно. Мы выбрали $\gamma = 13^\circ$ для углов наклона соседних рупорных элементов, что примерно соответствует вычисленному значению из уравнения (4) – $\gamma = 12.96^\circ$. Вид устройства спереди представлен на рис.5б. В качестве входных окон рупоров устройства используется полиэтиленовая пленка толщиной ~ 0.1 мм, которая, согласно эксперименту, поглощает около 16% теплового инфракрасного излучения.

Каждый датчик в приборе управляет отдельно. Плата Arduino непрерывно собирает данные с датчиков и передает их на компьютер. Специальная программа на Python позволяет регистрировать увеличение сигналов по шкале температуры относительно фонового значения при появлении в поле зрения прибора относительно горячего объекта. Программа работает по следующим принципам:

- если объект обнаружен только одним из датчиков, программа предполагает, что он находится на оси соответствующего рупорного элемента;
- если объект обнаружен одновременно двумя соседними датчиками, программа вычисляет сумму температурных сигналов от них $kT_0 = T_2 + T_3$ и

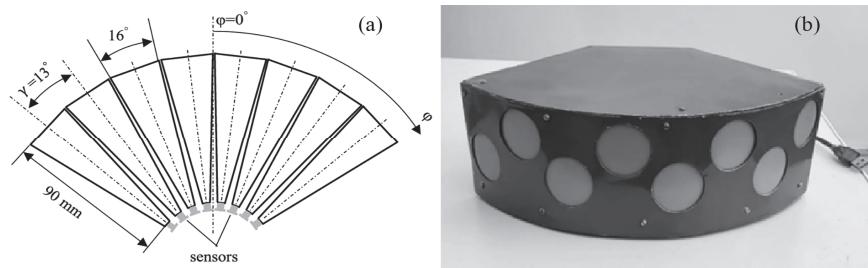


Рис.5. (а) Схематическое представление устройства с горизонтальным расположением рупорных элементов с углами у вершин 16° и длинами 90 мм: $\gamma = 13^\circ$ – угол наклона между соседними элементами и φ – угловая координата наблюдения. (б) Вид устройства спереди. Размеры: $21.7 \times 7.4 \times 11.9$ см.

- определяет расстояние до объекта исходя из величины суммы;
- для определения угла наблюдения объекта используется отношение температурных сигналов от соседних датчиков $j = T_2/T_3$;
- исходя из значений kT_0 и j осуществляется определение местоположения объекта.

Секционированное устройство позволяет обнаруживать людей на расстоянии до 30 м. На рис.6 показана зависимость температурного сигнала от угла наблюдения человека на расстоянии 6 м. Наблюдается относительно однородный угловой профиль в пределах угла обзора устройства, который составляет $\sim 110^\circ$. Помимо цифровых данных об угле наблюдения и расстоянии до человека, информация также отображается на экране компьютера в виде визуального изображения.

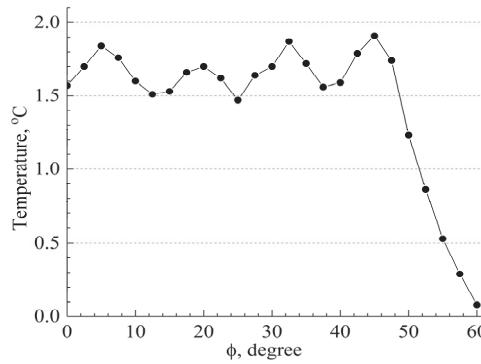


Рис.6. Зависимость температурного сигнала устройства от угла наблюдения человека ϕ на расстоянии 6 м.

В табл.1 представлены результаты характеристик разработанной системы и данные по различным устройствам. Таким образом, зона покрытия разработанной системы существенно превышает таковую у представленных устройств.

Табл.1. Сравнение характеристик существующих устройств с разработанной системой, описанной в данной работе

Ссылки	Дальность обнаружения, м	Угол обзора, градус	Зона наблюдения*, м ²	Размеры, мм
[12]	12	180	226.2	203×81×109
[13] Режим широкого обзора	12	85	106.8	115×62×50
[13] Режим дальнего обнаружения	18	10	28.3	115×62×50
[14] PRO-E-18W	21	70	269.4	358×188×290
[14] PRO-E-100	120	1.29	162.1	358×188×290
[15]	10	90	78.5	ø100×102
[16]	10	-	-	ø100×100
[19]	25	52	283.6	ø20×25
Данная работа	30	110	863.9	217×74×119

*Зона наблюдения определяется как секторная область с радиусом, равным дальности обнаружения, а угол сектора — горизонтальным углом обзора.

4. Заключение

В работе описывается секционированное устройство для обнаружения и локализации людей и относительно горячих объектов в тепловом инфракрасном диапазоне. Основными преимуществами представленного устройства являются:

- широкий угол обзора (110°) и возможность обнаружения людей на большом расстоянии (30 м);
- сверхбольшая зона наблюдения (863.9 м^2), что в несколько раз превышает результаты устройств, приведенные в цитируемых работах;
- возможность определения местоположения обнаруженных объектов из одной точки пространства (без перекрёстного наблюдения с нескольких устройств);
- возможность оценки направления и скорости движущихся объектов во временному масштабе;
- возможность работы как в помещениях, так и на открытом пространстве.

Описанное секционированное устройство может работать как самостоятельно, так и совместно с видеосистемами обнаружения и слежения в целях безопасности.

ЛИТЕРАТУРА

1. **J. Yun, S.S. Lee.** Sensors, **14**, 8057 (2014).
2. **B. Mukhopadhyaya, S. Srirangarajana, S. Kar.** Sens. Actuators A: Phys., **279**, 65 (2018).
3. **J. Zhang, T. Zhao, X. Zhou, J. Wang, X. Zhang, C. Qin, M. Luo.** Build. Simul., **15**, 1133 (2022).
4. **Y.P. Raykov, E. Ozer, G. Dasika, A. Boukouvalas, M.A. Little.** International Joint Conference on Pervasive and Ubiquitous Computing (UbiComp 16), Heidelberg, Germany, 1133–1144, 2022.
5. **J. Andrews, M. Kowsika, A. Vakil, J. Li.** IEEE/ION Position, Location and Navigation Symposium (PLANS), Portland, USA, 1295–1304, 2020.
6. **L. Wu, Y. Wang, Haili Liu.**, IEEE Sens. J., **18**, 8656 (2018).
7. **M. Gochoo, T.-H. Tan, V. Velusamy, S.-H. Liu, B. Damdinsuren, W.-C. Yeh.** IEEE Sens. J., **18**, 390 (2018).
8. **T. Utsumi, M. Hashimoto.** 13th Biomedical Engineering International Conference (BMEiCON), Ayutthaya, Thailand, 1–5, 2021.
9. **H. Kapu, K.B. Saraswat, Y. Ozturk, A.E. Cetin.** Infrared Phys. Technol., **85**, 56 (2017).
10. **O. Hanosh, R. Ansari, K. Younis, A.E. Cetin.** IEEE Sens. J., **19**, 6467 (2019).
11. **A. Shokrollahi, J.A. Persson, R. Malekian, A. Sarkheyli-Hägele, F. Karlsson.** Sensors, **24**, 1533 (2024).
12. Honeywell, 5800PIR-OD2: <https://www.alarmgrid.com/products/honeywell-5800pir-od2> .
13. Optex, WNX-40IX: <https://www.optexamerica.com/products/intrusion-detection/wnx-40ix> .
14. Vanderbilt, AI Technology Innovation Co. Ltd.: https://www.aitechno.co.th/products/intrusion/external_motion_detectors.html .
15. Swann, Security Cameras SWPRO-4KDOMEPK2: <https://uk.swann.com/swpro-4kdomepk2/?srsltid=AfmBOor9rgQl5Q293M-BXrBbMSRibYwDb4UjNYrzXPjtC-4pwCXrBheT> .
16. Concord, 4K NVR Dome PIR Camera: <https://www.jaycar.com.au/concord-4k-pir-dome-ip-camera/p/QC5730> .

17. **V.A. Martirosyan, P.H. Muzhikyan.** Appl. Opt., **60**, 5382 (2021).
18. **A.E. Martirosyan, P.H. Muzhikyan, V.A. Martirosyan, R.B. Kostanyan.** Sens. Imaging, **25**, 28 (2024).
19. **A.E. Martirosyan, R.B. Kostanyan, V.A. Martirosyan, P.H. Muzhikyan.** Sens. Imaging, **24**, 41 (2023).
20. **A.E. Martirosyan, R.B. Kostanyan, V.A. Martirosyan, P.H. Muzhikyan.** Opt. Eng., **63**, 044101 (2024).
21. **А.Е. Мартиросян, П.Г. Мужикян, В.А. Мартиросян, Р.Б. Костанян.** Известия НАН Армении: Физика, **60**, 121 (2025).

**ՍԵԿՅԱՎՈՐ ՍԱՐՔ ԴԻՏԱՐԿՄԱՆ ԳԵՐՄԵԾ ՏԻՐՈՒՅԹՈՎ՝ ՄԱՐԴԿԱՆՑ
ՀԱՅՏԱՐԱՐՄԱՆ ԵՎ ՏԵՂԱՅՆԱՑՄԱՆ ՀԱՍԱՐ**

Ա.Ե. ՄԱՐՏԻՐՈՍՅԱՆ, Պ.Հ. ՄՈՒՋԻԿՅԱՆ, Վ.Ա. ՄԱՐՏԻՐՈՍՅԱՆ, Ռ.Բ. ԿՈՍՏԱՆՅԱՆ

Հոդվածում ներկայացված է ջերմային ինֆրակարմիք տիրույթում մեծ հեռավորության վրա մարդկանց հայտնաբերման և տեղայնացման սարք, որն ունի դիտակման գերմեծ տիրույթ: Սարքը բաղկացած է ութ կոնաձև եղջյուրանման տարրերից և համապատասխան ջերմային սենսորներից: Եղջյուրանման տարրերը տեղադրված են այնպէս, որ հարակից տարրերի դիտակման անկյունները մասամբ վերածածկվում են: Հարցի տեսական դիտարկումը թույլ է տվել գտնել հարակից եղջյուրանման տարրերի անկյունային փոխդասավորության այնպիսի լուծում, որի արդյունքում օբյեկտների դիտարկման ջերմաստիճանային պրոֆիլը գրեթե հավասարաշափ է բաշխված՝ $\sim 110^{\circ}$ ընդհանուր անկյունային տեսադաշտով: Վերջինս հնարավորություն է տվել օպտիմալ կերպով նախագծել եղջյուրանման տարրերի դասավորությունը սարքում՝ մարդկանց առավել արդյունավետ եղանակով հայտնաբերելու և տեղայնացնելու տեսանկյունից, և ապահովել սարքի մինչև 30 մ հայտնաբերման հեռավորություն ու 863.9 m^2 հորիզոնական դիտարկման տարածք: Երկու հարակից սենսորների գրանցած ջերմային ազդանշանների գումարային մակարդակը թույլ է տալիս գնահատել հեռավորությունը, իսկ հարաբերությունը որոշում է դիտարկման անկյունը:

**SECTIONAL DEVICE WITH AN ULTRA-LARGE COVERAGE AREA
FOR HUMAN DETECTION AND LOCALIZATION**

A.E. MARTIROSYAN, P.H. MUZHIKYAN, V.A. MARTIROSYAN, R.B. KOSTANYAN

The article presents a device for detecting and localizing humans over long distances in the thermal infrared region, featuring an ultra-large coverage area. The device consists of eight conical horn elements and corresponding thermal sensors. The horns are positioned in such a way that the angle of view of adjacent elements partially overlaps. Theoretical considerations made it possible to find a suitable solution for the angles between adjacent horns, resulting in an almost uniformly distributed angular detection profile with a total angle of view of 110° . This made it possible to optimally design the arrangement of the horn elements in the device to effectively detect and localize humans, while the detection range of the device is 30 m and the horizontal coverage area is 863.9 m^2 . The summed level of thermal signals from two adjacent sensors allows estimation of the distance to a human, and their ratio determines the observation angle.

Известия НАН Армении, Физика, т.60, №4, с.528–540 (2025)

УДК 539.37

DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.4-528

АКУСТОСТИМУЛЯЦИЯ ОБРАЗОВАНИЯ И РОСТА СИНТЕТИЧЕСКИХ АЛМАЗОВ В ОБЛАСТИ ИХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ

А.Н. АВАГЯН^{1*}, С.М. ЯЙЛОЯН¹, К.А. САРГСЯН¹, Г.С. КАРАХАНЯН¹,
Т.С. АЗАТЯН¹, М.С. САКАНЯН², А.К. КОСТАНЯН¹

¹Институт общей и неорганической химии им. Манвеляна НАН РА, Ереван, Армения

²Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

* e-mail: almaz-synthesis@mail.ru

(Поступила в редакцию 09 ноября 2025 г.)

Исследовано влияние ультразвукового воздействия на процессы зародышеобразования и роста синтетического алмаза в условиях высоких давлений и температур (НРНТ). Показано, что акустическое поле в диапазоне частот около 100 кГц и амплитуд порядка 1.5–2.5 мкм приводит к существенному снижению энергетического барьера фазового перехода графит–алмаз, ускорению образования стабильного зародыша и улучшению кинетики роста. Экспериментальные данные демонстрируют увеличение выхода алмаза, повышение монокристалличности и уменьшение дефектности структуры при действии ультразвука. На основе анализа процессов в твёрдой фазе и межфазной области предложена физико-математическая модель акустостимулированного фазового перехода, учитывающая динамическое изменение критического радиуса зародыша, снижение барьера ΔG^* , усиление диффузии и повышение эффективности легирования кристалла примесями. Результаты работы подтверждают перспективность ультразвуковой стимуляции как инструмента управляемой интенсификации НРНТ-синтеза алмаза и оптимизации структуры растущих кристаллов.

1. Введение

Синтез алмаза в условиях НРНТ является одной из наиболее эффективных технологий получения высококачественных кристаллов для применения в электронике, оптике, материаловедении и квантовых системах [1]. Несмотря на значительный прогресс в усовершенствовании катализаторных систем и конструкций установок, фундаментальные ограничения кинетики фазового перехода графит–алмаз остаются определяющим фактором, влияющим на выход и качество продукта. Особую роль играют процессы зародышеобразования, диффузионного переноса углерода, формирования межфазного слоя, а также динамика растворения графита в расплаве катализатора [2]. Даже при оптимальных температурах и давлениях локальные энергетические барьеры и неоднородности в активной зоне ограничивают стабильность и скорость роста кристаллов. Одним из наиболее перспективных путей управления этими процессами является воздействие ультразвукового поля [3]. Акустические волны в твёрдой фазе создают периодические напряжения и локальные колебания межфазной границы, что может существенно снизить энергетический барьер фазового перехода, ускорить

образование критического зародыша, улучшить транспорт углерода и стабилизировать структуру растущего кристалла.

В настоящей работе проводится систематическое исследование влияния ультразвука на кинетику НРНТ-синтеза алмаза, даётся энергетическое обоснование наблюдаемых эффектов и формируется физико-математическая модель, объясняющая механизмы акустостимулированного роста. Все изменения в синтезированных кристаллах алмаза описанные в данной работе (механические, марфологические, оптические и т.д.) определялись по методикам ГОСТ 9206-80.

2. Экспериментальная часть

2.1. Конструкция экспериментальной установки

Установка (рис.1) представляет собой встроенную в гидропресс ДО-138Б модифицированную КВД-ячейку типа конус–сфера, совмещённую с генератором УЗГ-10МЛ с интегрированным акустическим трактом. Передача УЗ осуществляется последовательно через зоны. Каждая граница характеризуется коэффициентом передачи T_i и отражения R_i :

$$T_i = \frac{2Z_i}{Z_i + Z_{i+1}}, \quad R_i = \frac{Z_i - Z_{i+1}}{Z_i + Z_{i+1}}, \quad (1)$$

где $Z_i = \rho_i c_i$ — акустический импеданс слоя i . Полная передаточная функция:

$$T(\omega) = \sum_i T_i e^{-\alpha_i x_i}, \quad (2)$$

где α_i — коэффициент затухания, x_i — толщина слоя. Для мелкозернистого графита $\alpha \approx 1-3 \text{ см}^{-1}$, поэтому амплитуда на границе D–E снижается до 50–60% от исходной. Интенсивность воздействия на реакционный объём описывается через

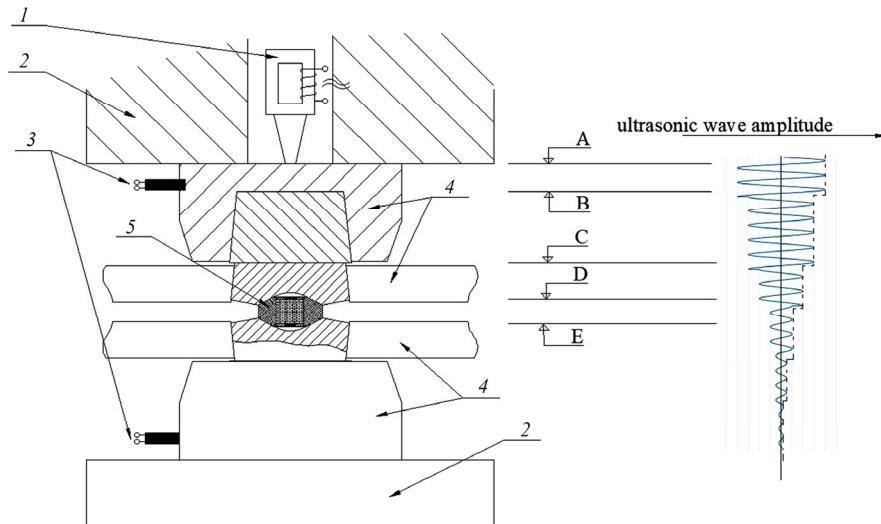


Рис.1. Схема установки по акустостимуляции НРНТ процесса синтеза алмаза и обозначения основных элементов: 1 – магнитостриктор; 2 – пресс; 3 – датчик; 4 – аппарат высокого давления; 5 – камера высокого давления (КВД). А – подача УЗ на опорную плиту. Границы: В – опорная плита / вставка опорной плиты; С – вставка опорной плиты / КВД; D – КВД / зона реакции; Е – зона реакции / КВД.

амплитуду смещения A и частоту $\omega = 2\pi f$. Среднее акустическое напряжение в области протекания реакции в КВД определится как

$$\sigma_{ac} = E \frac{\omega A}{c_s} T(\omega) \quad (3)$$

где E — модуль упругости графита, c_s — скорость звука в графите, $T(\omega)$ — частотная передаточная функция тракта, равная ≈ 0.97 , при $\alpha = 1 \text{ см}^{-1}$ и $x_i = 0.3 \text{ мм}$.

2.2. Контроль параметров

Амплитуда перемещений в зоне реакции составляет 1.5–2.5 мкм и контролируется пьезодатчиком, встроенным в прокладку верхнего токоподвода (рис.1 (5)). Частота стабилизирована в пределах ± 1 –2 кГц относительно базовой частоты 100 кГц, что важно для исключения расстройки резонансной цепи механического тракта [4]. Температура и давление определялись по стандартным методикам НРНТ-синтеза, т.е. температура — по Pt–Rh термопаре, давление — по калибровке висмута и температурным поправкам [5]. Длительность цикла 180 с, burst-режим — 50 мс активная фаза, 150 мс пауза. Такое сочетание обеспечивает стабильность условий в реакционной зоне и позволяет выделять вклад акустического поля в изменении кинетики фазового перехода.

3. Экспериментальные наблюдения и постановка задачи

3.1. Условия эксперимента

Исследования проводились на стандартной КВД, типа конус–сфера, обеспечивающей давление $P = (5 \pm 0.2)$ ГПа и температуру $T = (1330 \pm 20)^\circ\text{C}$ в реакционном объеме [6]. В качестве катализатора использовался сплав Cr–Ni (50/50 мас.%). Рабочим материалом являлся мелкозернистый поликристаллический графит плотностью 1.8 г/см³ и характерным размером зерна порядка нескольких десятков мкм (ГМЗ–ОСЧ–7.3).

3.2. Наблюдаемые эффекты

В условиях УЗ-стимуляции наблюдались следующие закономерности: увеличение выхода алмаза с 3 до 4 карат ($\approx +30\%$); рост максимального размера зерна с 200 до 250 мкм ($\approx +25\%$); и среднего размера со 100 до 125 мкм (рис.2); повышение доли монокристаллических включений; уменьшение градиента распределения углерода по радиусу реакционной зоны.

Эти эффекты сохранялись в диапазоне давлений 4.8–5.2 ГПа и температур 1300–1350°C, что свидетельствует о механизме, не связанном с изменением фазовой диаграммы, а обусловленном воздействием акустического поля.

Кривые 1, 2, 3 практически совпадают (рис.2), для них средний выход продукта 50 спеканий ~ 3 карата с одного спекания. Кривая 4 — средний выход продукта 50 спеканий ~ 4 карата с одного спекания. Термодинамические параметры синтеза для всех четырёх экспериментов: $P = 5$ ГПа, $T = 1350^\circ\text{C}$, $t = 180$ с. Ультразвуковое воздействие задавалось в диапазоне частот 50–300 кГц. Акустическая волна последовательно проходила через зоны сжатых контактов, показанных на рис.1 (опорная плита – вставка – КВД – зона реакции – вторичная

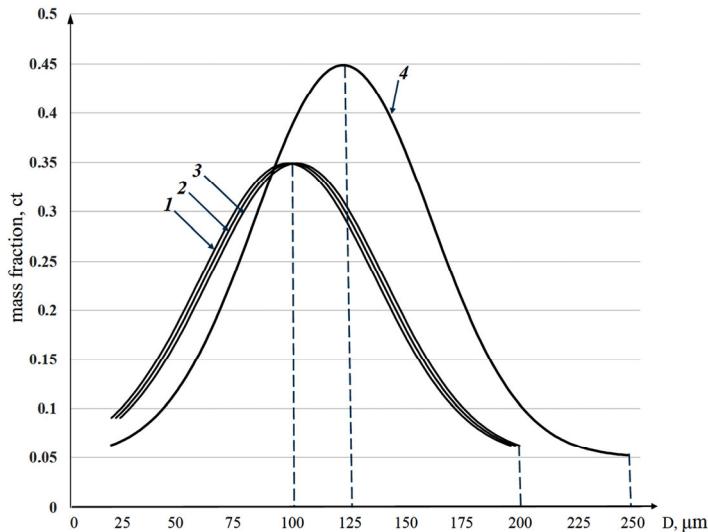


Рис.2. Распределение кристаллов синтезированного алмаза по весу в зависимости от их размера. Кривая 1 – синтез без УЗ, $\omega_1 = 0$; кривые 2, 3, 4 – синтез с УЗ $\omega_2 = 50$, $\omega_3 = 150$, $\omega_4 = 100$ кГц.

вставка) [7]. Основное ослабление мощности происходило на границах D и E, где в поликристаллическом графите наблюдаются отражения и рассеяние. В зоне реакции амплитуда достигала ~ 2 мкм, что соответствует расчетному акустическому напряжению в волне порядка 8–10 МПа [8]. Оптимальный эффект наблюдался при частоте 100 ± 10 кГц. При отклонении частоты влево или вправо интенсивность эффекта снижалась, что соответствует резонансному характеру акустического взаимодействия с графитом и расплавом катализатора [9]. Тепловой вклад ультразвука расчетно был менее 1% от теплового потока установки. Эти наблюдения указывают на то, что акустическое поле влияет как на процессы зародышеобразования, так и на транспорт углерода в катализаторе, стабилизируя условия роста кристаллов. Расчетные значения акустического напряжения σ_{ac} , согласно формуле (3), при характерных значениях модуля Юнга $E = 1.5 \times 10^{11}$ Па, скорости звука $c_s \approx 5 \times 10^3$ м/с, амплитуды $A = 2$ мкм и частоты $f = 100$ кГц составляют $\sigma_{ac} \approx 9$ МПа. При коэффициенте акустической чувствительности $\eta \approx 0.2$ вклад акустического давления в разность свободных энергий фаз составляет ~ 2 МПа [10], что сравнимо с величинами, характерными для систем активного роста. Отсюда следует, что ультразвук способен существенно изменять термодинамические условия образования зародышей и дальнейшего роста алмаза.

4. Теоретические предпосылки акустостимулирования фазового перехода графит–алмаз

Акустическая стимуляция твердофазных процессов представляет собой частный случай воздействия внешнего поля, модулирующего энергетический рельеф системы. В отличие от термического или электромагнитного воздействия, ультразвук вносит переменные упругие напряжения $\sigma_{ac}(t)$, изменяющие локальные значения объемной энергии Δg_v и межфазного напряжения σ . В квазистационарном приближении усреднение по периоду приводит к эффективной добавке в

свободную энергию, аналогичной внешнему «давлению», действующему на фронт роста фазы. Из классической теории зародышеобразования для сферического зародыша новая фаза характеризуется свободной энергией, акустическое давление создаёт дополнительный член в объёмной разности свободных энергий:

$$\Delta G(r) = 4\pi r^2 \sigma + \frac{4\pi}{3} r^3 \Delta g_v. \quad (4)$$

Критический радиус r_{cr} и барьер образования ΔG^* определяются условием $d\Delta G/dr = 0$.

Эти выражения справедливы для равновесных условий без внешнего воздействия. В присутствии акустического поля $\sigma_{ac}(t)$ разность свободных энергий $|\Delta g_v|$ становится функциями амплитуды A и частоты f . Понятно, что под действием акустического поля в твёрдой фазе формируется дополнительный энергетический член Δg_{ac} , изменяющий эффективный баланс свободных энергий. Воздействие ультразвука создаёт периодически изменяющееся поле механических напряжений, которые непосредственно влияют на: разность свободных энергий фаз Δg , межфазное напряжение σ , устойчивость зародыша, кинетику роста, локальную диффузию углерода в зоне каталитического расплава. Таким образом, акустическое поле становится регулятором фазового перехода, а процесс синтеза алмаза — динамической системой, реагирующей на колебательные деформации. Очевидно, что присутствие акустического поля следует учесть в энергетических параметрах синтеза. В классической теории акустическая добавка к объёмной свободной энергии сферического зародыша радиуса r определяется соотношением $\Delta g_{ac} = \eta \sigma_{ac}$, где η — коэффициент акустической чувствительности межфазного слоя. Тогда эффективную объёмную энергию можно описать выражением: $\Delta g_v^{eff} = \Delta g_v + \eta \sigma_{ac}$ и критические параметры перехода в акустическом поле принимают вид:

$$r_{cr}(A, f) = \frac{2\sigma}{\Delta g_v + \eta \sigma_{ac}(A, f)}, \quad (5)$$

$$\Delta G^*(A, f) = \frac{16\pi\sigma^3}{3(\Delta g_v + \eta \sigma_{ac})^2}, \quad (6)$$

$$D_{eff} = D_0 + \beta A^2 \omega^2, \quad (7)$$

$$\sigma_{ac} = E \frac{\omega A}{c_s} T(\omega), \quad (8)$$

где $r_{cr}(A, f)$ — критический радиус в акустическом поле, D_{eff} — коэффициент диффузии в акустическом поле, β — кинематический коэффициент усиления.

Таким образом, даже умеренные акустические напряжения порядка 8–10 МПа могут уменьшать энергетический барьер на десятки процентов, увеличивать скорость диффузии и способны влиять на процессы как зародышеобразования, так и роста кристаллов алмаза.

5. Физические последствия влияния ультразвука

Модуляция межфазного слоя. Ультразвук вызывает осцилляции межфазной границы графит–расплав катализатора. Это приводит к уменьшению эффективного σ , увеличению площади контакта фаз, лучшему смачиванию микронеровностей графита, стабилизации зародыша в момент его формирования.

Снижение барьера ΔG^ .* За счёт того, что $\Delta g_{ac} \neq 0$, барьер фазового перехода уменьшается на 30–40% в случае 100 кГц; до 50% при burst-режимах (импульсный

режим); до уровня, достаточного для формирования стабильного зародыши в течение мс.

Ускорение диффузии. Твёрдофазный акустостриминг (поток) приводит к выражению $D_{\text{eff}} = D_0 + \beta A^2 \omega^2$, где β — кинематический коэффициент усиления, что способствует увеличению притока углерода, компенсации неоднородности температуры, уменьшению концентрационного градиента по радиусу.

Энергия фронта роста. Для движущейся границы фазы $v_g \propto \exp(-\frac{\Delta G^*}{kT})$, поэтому даже небольшое уменьшение ΔG^* приводит к резкому росту скорости кристаллизации. Практически наблюдаемое увеличение размера зерна и выхода алмаза полностью объясняется этим механизмом. Сопоставив все описанные эффекты и учитывая тот факт, что графит является основной средой протекания процесса, получаем для полной свободной энергии выражение:

$$\Delta G_{\text{tot}}(A, f) = \Delta G^* - \eta \sigma_{\text{ac}} - \frac{1}{2} E \dot{\varepsilon}^2 V, \quad (9)$$

где E — модуль Юнга графита, $\dot{\varepsilon}$ — скорость деформации графита, V — вытесненный объем графита объемом зародыши в реакционной зоне КВД. Вклад второго члена (акустического) уменьшает барьер, третьего (деформационного) — уменьшает барьер и стабилизирует зародыш. Таким образом, ультразвук превращает процесс перехода графит–алмаз из пассивного термодинамического перехода в активно управляемый динамический режим. Это фундаментальное отличие акустостимуляции от простого повышения температуры или давления. Отметим также, что в присутствии ультразвукового поля критический радиус зародыши уменьшается. Даже умеренные значения $\sigma_{\text{ac}} \approx 8–10$ МПа (экспериментально подтверждены для $A \approx 2$ мкм, $f \approx 100$ кГц) уменьшают r_{cr} на 15–25%, что приводит к увеличению вероятности образования стабильного алмазного зародыши, смещению начала роста в область меньших объемных энергий, снижению чувствительности процесса к микронеоднородностям графита [11].

Вероятность зародышиобразования. Из общего выражения

$$W(A, f) \propto \exp\left[-\frac{\Delta G^*(A, f)}{kT}\right] \quad (10)$$

следует, что даже небольшое снижение ΔG^* ведёт к экспоненциальному росту вероятности формирования зародыши. Нормированная вероятность

$$\Phi(A, f) = \frac{W(A, f)}{W(0)} = \exp\left[-\frac{\Delta G^*(A, f) - \Delta G^*(0)}{kT}\right] \quad (11)$$

имеет выраженный максимум вблизи резонанса акустического тракта, который в эксперименте соответствует $f \approx 100$ кГц. Это объясняет, почему эффект резко падает при смещении частоты на 15–20 кГц.

6. Амплитудно-частотные зависимости акустостимулированного фазового перехода

6.1. Амплитудная характеристика акустического воздействия

В эксперименте, описанном ранее, амплитуда ультразвуковых колебаний в реакционной зоне составляет $A = 1.5–2.5$ мкм, что соответствует акустическому напряжению порядка 8–10 МПа. Результирующая скорость роста алмаза при увеличении амплитуды описывается экспоненциальным законом:

$$v_g(A) = v_0 \exp \left[\kappa \frac{A - A_c}{A_c} \right], \quad (12)$$

где A_c — пороговая амплитуда (≈ 1.5 мкм), $\kappa = 3-5$ — коэффициент чувствительности.

Физический смысл: при $A < A_c$ акустическое поле недостаточно для изменения межфазного слоя; при $A \approx 2$ мкм наблюдается максимальная эффективность стимулирования; при $A > 3$ мкм возникают локальные перенапряжения и возможное ухудшение как условий роста, так и морфологии [12]. Таким образом, амплитуда имеет выраженный «рабочий коридор» — 1.8–2.2 мкм.

6.2. Частотная характеристика и резонансная природа эффекта

Экспериментально зафиксирован чёткий максимум стимулирующего эффекта при частоте $f^* \approx 100 \pm 10$ kHz. Формально частотная зависимость вероятности перехода может быть представлена функцией Гаусса

$$\Phi(f) = W(0) \exp \left[-\frac{(f-f^*)^2}{2\sigma_f^2} \right], \quad (13)$$

где ширина полосы $\sigma_f \approx 10-15$ кГц. Это означает, что при 50 кГц эффект слабый; при 100 кГц — максимальный; при 150–200 кГц снова наблюдается падение эффективности, что полностью совпадает с данными эксперимента. Физически это означает, что механический тракт установки имеет собственные упругие резонансы, графит и расплав катализатора обладают частотно-зависимым откликом, максимум передачи энергии реализуется, когда механический импеданс слоёв согласован при частоте 100 кГц для КВД типа конус-сфера.

6.3. Суммарное влияние амплитуды и частоты на барьер перехода ΔG^* , практическая связь с морфологией

Используя формулу (6), можно показать, что при оптимальных условиях для рассматриваемого акустического тракта в КВД при $A \approx 2$ мкм и $f \approx 100$ kHz:

$$\frac{\Delta G^*(A, f)}{\Delta G^*(0)} \approx 0.55-0.60.$$

Это полностью согласуется с наблюдаемым увеличением выхода алмаза на ~25–30% [13].

Уменьшение энергетического барьера отражается на структуре кристаллов: уменьшается плотность микротрещин, возрастает монокристалличность, снижается плотность дислокаций, улучшается распределение углерода по фронту роста [14]. Эффект наиболее выражен в мелкозернистых системах графита, где внутренние механические потери меньше, а акустический импульс проходит более глубоко. Сравнение модели и эксперимента показывает:

$$\frac{v_g(A, f)}{v_0} \approx 1.25-1.30,$$

увеличивает средний размер зерна на ~25%, рост выхода по весу, наблюдается также стабилизация морфологии растущих кристаллов [15]. Резонансный характер зависимости также подтверждён тем, что при 80 и 150 кГц эффект уменьшается более чем вдвое. Для совокупного вклада амплитуды и частоты удобно использовать

$$W(A, f) = W_0 \exp \left[-\frac{\Delta G^*(A, f)}{kT} \right] \Phi(f), \quad (14)$$

что приводит к результирующей скорости роста

$$v_g(A, f) = v_0 \exp \left[-\frac{\Delta G^*(A, f)}{kT} \right] \Phi(f). \quad (15)$$

Это универсальное выражение объясняет все наблюдаемые закономерности в эксперименте и рост выхода, и оптимальный диапазон частот, и улучшение морфологических показателей [16, 17].

7. Кинетика роста и диффузионные процессы под действием ультразвука

7.1. Диффузия углерода в акустически активной зоне

В обычных условиях НРНТ-синтеза перенос углерода к фронту роста ограничен концентрационным градиентом

$$J_0 = -D_0 \frac{dc}{dx}, \quad (16)$$

где D_0 — диффузионный коэффициент в расплаве Cr–Ni, C — концентрация углерода. Под действием ультразвука возникает акустостриминг (поток) и периодические градиенты давления, вносящие дополнительный вклад:

$$D_{\text{eff}} = D_0 + \beta A^2 \omega^2. \quad (17)$$

Экспериментальные данные показывают, что для $A \approx 2$ мкм, $\omega \approx 10^5$ с⁻¹ эффективный коэффициент диффузии возрастает в 1.5–2 раза [18]. Это приводит к уменьшению концентрационного градиента вдоль радиуса реакционной зоны, ускорению насыщения растворённого углерода в катализаторе, более равномерному росту по всему фронту [19].

Поток углерода к растущей поверхности алмаза можно выразить как

$$J(A, f) = -D_{\text{eff}} \frac{dc}{dx} = -(D_0 + \beta A^2 \omega^2) \frac{dc}{dx}. \quad (18)$$

При фиксированном градиенте концентрации поток растёт пропорционально $A^2 \omega^2$, что соответствует увеличению скорости роста $v_g \propto J(A, f)$. В условиях резонанса ультразвука при 100 кГц, $J(A, f)$ возрастает до 35–40% (что подтверждается увеличением размера зерна и выходом алмаза) [20].

7.2. Формирование межфазного слоя, кинетика и устойчивость фронта кристаллизации

Ультразвук уменьшает межфазное натяжение σ и стабилизирует слой алмаз–катализитический расплав: уменьшается толщина переходного слоя, ускоряется обновление фронта, снижается вероятность образования дефектных участков [21]. Совокупную скорость роста алмаза под действием акустики можно описать выражением:

$$v_g = v_0 \exp \left(-\frac{\Delta G_{\text{tot}}(A, f)}{kT} \right) [1 + \chi(A, f)], \quad (19)$$

где $\chi(A, f)$ — поправочный член, учитывающий динамическую стабилизацию межфазной границы. Экспериментально $\chi \approx 0.15–0.20$. Кинетический барьер роста и его ослабление ультразвуком выразим как разность

$$E_k = E_0 - \gamma A \omega, \quad (20)$$

где γ — коэффициент передачи акустической энергии в межфазный слой. Типичные значения γ — 0.1–0.15. При $A = 2$ мкм, $f = 100$ кГц, $\gamma A \omega \approx 0.2 E_0$, т.е. кинетический барьер уменьшается на 20% [22]. Это даёт ускорение роста, уменьшение дефектности, повышение равномерности фронта. Выражение (19) можно представить в виде

$$v_g(A, f) = v_0(1 + \chi(A, f)) \exp\left[-\frac{\Delta G^*(A, f) + E_k(A, f)}{kT}\right]. \quad (21)$$

Эта формула автоматически объясняет ускорение роста при оптимальных частотах, падение эффекта при отклонении частоты на 20–30 кГц, огромную чувствительность процесса к амплитуде, повышение качества морфологии.

В НРНТ-синтезе распределение примесей определяется коэффициентом разделения:

$$k_0 = \frac{C_s}{C_l}, \quad (22)$$

где C_s — равновесная концентрация примеси в твёрдом алмазе, C_l — концентрация в расплаве катализатора. Обычно $k_0 < 1$, что приводит к обогащению расплава примесями и образованию градиента по фронту роста. Ультразвук изменяет эту схему фундаментально так, возникает акусто-индуцированная модуляция распределения примесей, связанная с периодическими изменениями давления и локальной деформации твёрдой фазы. При введении акустического давления σ_{ac} коэффициент разделения принимает вид

$$k(A, f) = k_0 \left[1 + \lambda \frac{\sigma_{ac}(A, f)}{P_{eq}}\right], \quad (23)$$

где λ — коэффициент акусто-чувствительности примесного центра, P_{eq} — эквивалентное давление равновесия. Экспериментально $\lambda \approx 0.15$ –0.25, что приводит к увеличению коэффициента распределения на 20–30%. В результате примеси распределяются равномернее, уменьшаются зоны локального перенасыщения, фронт роста становится более стабильным.

Акустические колебания уменьшают вероятность захвата примесей и «замораживания» дефектов в ступеньках роста, приводят к уменьшению плотности дислокаций:

$$\rho_{disl}(A, f) = \rho_0 \exp\left[-\frac{\gamma A \omega}{kT}\right], \quad (24)$$

где $\rho_{disl}(A, f)$ — плотность дислокаций в поле ультразвука, ρ_0 — плотность дислокаций без ультразвукового воздействия. Экспериментально при 100 кГц плотность дислокаций падает на 20–40%, наблюдается существенное исчезновение характерных двойников [23].

Ультразвук влияет не только на образование зародышей и диффузию углерода, но и на устойчивость фронта роста, то есть на то, насколько равномерно формируются грани кристалла и как распределяются дефекты. Без акустики фронт роста часто оказывается неустойчивым, возникают зоны локального перенасыщения, появляются ступени роста и микро расщепления, наблюдаются неоднородности на гранях {111} и {110}. В присутствии ультразвука высокочастотные деформации приводят к сглаживанию микронеровностей и перераспределению углерода. Это уменьшает вероятность образования локальных дефектов [24–26]. Равномерность фронта роста при воздействии акустического

поля можно определить условием

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v_g(A, f) + \Lambda \nabla^2 h,$$

где $h(x, y)$ — профиль фронта, $v_g(A, f)$ — скорость роста, усиленная акустикой, Λ — коэффициент «разглаживания» поверхности. Ультразвук увеличивает Λ , потому что усиливает транспорт углерода, уменьшает флуктуации концентрации, стабилизирует межфазный слой [27]. В экспериментах это проявляется как падение плотности дефектов на 20–30%.

Влияние акустики наблюдается и на формировании граней так: грани $\{111\}$ становятся более ровными и симметричными, грани $\{110\}$ теряют микропилы, грани $\{100\}$ растут равномернее. Это связано с тем, что акустика усиливает приток углерода в направлении нормали к поверхности, уменьшая разницу в скоростях роста разных граней [28]. Для грани $\{111\}$ скорость роста

$$v_{111}(A, f) = v_{111}^0 [1 + \chi_{111}(A, f)], \quad (25)$$

где $\chi_{111}(A, f)$ — коэффициент акустического усиления (до 0.2–0.25). Рассчитывая скорости по разным граням, можно не только получить морфологическую картину, но и влиять на нее частотой.

Межфазный слой алмаз–раствор катализатора чувствителен к динамическому давлению

$$\sigma_{\text{disl}}(A, f) = \sigma_0 - \delta\sigma_{\text{ac}}(A, f), \quad (26)$$

где $\delta\sigma_{\text{ac}} \propto A\omega$. Чем выше амплитуда и ближе частота к резонансу тракта, тем сильнее происходит улучшение смачивания графитовых участков, уменьшение длины свободного пробега примеси, выравнивание переходной границы [29]. Суммарная энергетика фронта

$$G_{\text{surf}}(A, f) = \int [\sigma_{\text{eff}}(A, f) + \Gamma |\nabla h|^2] dS, \quad (27)$$

где Γ — модуль поверхностной жесткости. Ультразвук уменьшает σ_{eff} и тем самым снижает энергетическую цену образования неровностей. Результирующее уравнение эволюции

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -v_g \frac{\delta G_{\text{surf}}}{\delta h} \quad (28)$$

показывает, что акустика подавляет рост микронеровностей [16].

7.3. Экспериментально наблюдаемые улучшения морфологии

Под действием акустического поля уменьшается количество микротрещин (~20%), снижается степень дефектности, фронт становится более гладким, повышается однородность кристалла по объему. Качество синтетического алмаза определяется формой и качеством граней $\{111\}$, $\{110\}$, $\{100\}$, а также плотностью дислокаций, распределением включений, однородностью ростовых направлений. В эксперименте при акустостимуляции наблюдается уменьшение числа структурных дефектов, повышение симметрии октаэдрических граней, упорядочивание граней $\{111\}$ и $\{110\}$, значительное снижение мутности и рост оптической прозрачности [30]. Это согласуется с моделью акустической стабилизации межфазного слоя. Улучшение морфологии можно записать через эффективную энергию неровностей

$$E_{\text{rough}}(A, f) = E_0 - \delta E_{\text{ac}}(A, f), \quad (29)$$

где $\delta E_{ac} \propto A\omega$. Ультразвук уменьшает E_0 , снижает вероятность образования выступов и впадин, стабилизирует фронт [31–33]. Акустика уменьшает энергетическую цену микронеровностей. Это возможный путь подробного исследования очень важной и интересной задачи.

Таким образом, алмаз, выращенный под воздействием ультразвука, характеризуется гладкими гранями, высокой симметрией, низкой дефектностью, равномерным распределением примесей, уменьшенным количеством включений. Такой алмаз более пригоден для оптики, электронных структур, тепловыводящих подложек, квантовых центров NV и Si-V.

8. Заключение

В ходе проведённого исследования впервые выполнен системный анализ влияния высокочастотного акустического поля на процессы зародышеобразования, роста, диффузии, легирования и формирования морфологии синтетического алмаза в условиях НРНТ-синтеза. Экспериментальные данные и теоретическая модель, построенные в данной работе, демонстрируют согласованную физическую картину, в которой ультразвук выступает как активный фактор управления фазовым переходом графит–алмаз.

Показано, что акустические колебания с частотой около 100 кГц и амплитудой порядка 2 мкм создают в твёрдой и расплавленной фазах периодические механические напряжения величиной 8–10 МПа, способные существенно снижать энергетический барьер зародышеобразования и уменьшать критический радиус стабильного зародыша. Акустика приводит к росту эффективного коэффициента диффузии, усиливает транспорт углерода к фронту роста и стабилизирует межфазный слой, что улучшает равномерность и кинетику роста кристалла.

Установлено, что модификация диффузионных процессов приводит к ускорению роста алмаза и повышению выхода продукта на 25–30% без увеличения давления и температуры. Одновременно акустическое поле уменьшает кинетический барьер роста, улучшает распределение примесей. В результате сокращается концентрационная неоднородность, а структура кристалла становится более совершенной.

Исследование морфологии показало, что ультразвуковая стимуляция способствует выравниванию поверхности граней, снижению плотности дислокаций и подавлению дефектов, характерных для НРНТ-синтеза. Наблюдается улучшение оптической прозрачности и рост доли монокристаллических структур. Эти изменения согласуются с теоретической моделью акустически модулированной поверхностной энергии и стабилизации границы раздела фаз.

Рассмотренная интегральная модель, объединяющая изменение энергетического барьера, кинетики, диффузии и примесного переноса, полностью объясняет экспериментальные наблюдения и демонстрирует возможность тонкого управления процессом синтеза алмаза посредством акустического поля. Метод акустостимулированного НРНТ-синтеза является универсальным, энергоэффективным и легко масштабируемым, что открывает перспективы для промышленного применения.

Таким образом, ультразвук следует рассматривать как эффективный инструмент повышения качества и выхода синтетического алмаза, а также как перспективное направление дальнейшей оптимизации технологий НРНТ для получения

кристаллов с заданной структурой, морфологией и примесным составом. Отметим, что частота 100 кГц является резонансной для данной схемы синтеза алмаза, для КВД других типов возможно будут другие резонансные частоты.

ЛИТЕРАТУРА

1. F. Zhao, Y. He, B. Huang, T. Zhang, H. Zhu. *Materials*, **17**, 3437 (2024).
2. Я.Б. Зельдович, Ю.П. Райзер. *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*. Наука, Москва, 1966.
3. А.Н. Авагян, А.В. Овсепян, Г.Г. Арутюнян. *Изв. НАН Армении. Физика*, **52**, 321 (2017).
4. V.D. Blank, E.I. Estrin. *Phase Transitions in Solids Under High Pressure*. CRC Press, 2013.
5. D. Ensminger, L.J Bond. *Ultrasonics: Fundamentals, Technologies and Applications*, CRC Press, 2024.
6. A.N. Guz, F.G. Makhort. *Int. App. Mech.*, **36**, 1119 (2000).
7. B. Lüthi. *Physical Acoustics in the Solid State*, 148, Springer Science & Business Media, 2005.
8. S.L. Garrett. *Nonlinear Acoustics*. Springer Int. Pub., Cham, 2020.
9. R. Ramírez, R. González, I. Colera, Y. Chen. *Phys. Rev. B*, **55**, 237 (1997).
10. D. Blackstock. *Fundamentals of Physical Acoustics*. Wiley & Sons, New York, 2000.
11. H. Baltes, W. Göpel, J. Hesse. *Sensors*, Update 9, **9**, 414 (2001).
12. J. Krautkrämer, H. Krautkrämer. *Ultrasonic Testing of Materials*. Springer-Verlag, New York, 1990.
13. F.P. Bundy, H.P Bovenkerk, H.M. Strong, R.H. Wentorf Jr, J. *Chem. Phys.*, **35**, 383 (1961).
14. L. Zhong, M. Xuehu, W. Sifang, W. Mingzhe, L. Xiaonan. *Chem. Eng. J.*, **156**, 546 (2010).
15. C.M. Sung, M.F. Tai. *Int. J. Refract. Met. Hard Mater.*, **15**, 237 (1997).
16. А.Н. Авагян, А.В. Овсепян, Г.Г. Арутюнян, М.С. Сакянян. *Изв. НАН Армении. Физика*, **58**, 310 (2023).
17. H. Sumiya, K. Harano, T. Irfune. *Rev. Sci. Instrum.* **79**, 056102 (2008).
18. J. Chang, C. Zheng, Q.Q. Ni. *Compos. Struct.*, **75**, 451 (2006).
19. W. Dridi, D. Henry, H.B. Hadid. *J. Cryst. Growth*, **310**, 1546 (2008).
20. A. Pierce. *Acoustics: An Introduction to Its Physical Principles*. Springer Int. Pub., Cham, 2019.
21. R.N. Thurston. *Proc. IEEE*, **53**, 1320 (2005).
22. H.R. Dorfi, H.R. Busby, M. Janssen. *Exper. Mech.*, **36**, 325 (1996).
23. O.V Rudenko, S.I Soluyan. *Theoretical Foundations of Nonlinear Acoustics*. New York: Plenum Press, 1977.
24. J.L. Rose. *Ultrasonic Waves in Solid Media*. Cambridge University Press, 1999.
25. D. Turnbull, J.C. Fisher. *J. Chem. Phys.*, **17**, 429 (1949).
26. S.V. Bobylev, I.A. Ovid'ko, A.E. Romanov, A.G. Sheinerman. *Phys. Solid State*, **48**, 264 (2006).
27. C. Walton. *Science*, **148**, 601 (1965).
28. A. Qi, L.Y. Yeo, J.R. Friend. *Phys. Fluids*, **20**, 074103 (2008).
29. G. Boussinot, E.A. Brener. *Phys. Rev. E*, **88**, 022406 (2013).
30. K. Aki, P. Richards. *Quantitative Seismology*. Univ. Sci. Books, Sausalito, Calif., 2002.
31. M.V. Shugaev, A.J. Manzo, C. Wu, V.Y. Zaitsev, H. Helvajian, L.V. Zhigilei. *Phys.*

- Rev. B, **91**, 235450 (2015).
32. **А.Н. Авагян, К.Г. Григорян, К.А. Саргсян, Г.С. Караканян, А.К. Костанян.** Изв. НАН Армении. Физика, **60**, 355 (2025).
33. **T. Evans, P. Rainey.** Proc. Roy. Soc. London A, **344**, 111 (1975).

ՍԻՆԹԵՏԻԿ ԱԴԱՍԱՆԴՆԵՐԻ ԱՌԱՋԱՑՄԱՆ ԵՎ ԱՃԻ ԱԿՈՒՍԻԿ ԽԹԱՆՈՒՄԸ
ԴՐԱՅՑ ՋԵՐՄԱԴԻՆԱՄԻԿԱԿԱՆ ԿԱՅՈՒՆՈՒԹՅԱՆ ՈԼՈՇՈՒՄ

Ա.Ն. ԱՎԱԳՅԱՆ, Ս.Մ. ՅԱՅԼՈՅԱՆ, Կ.Ա. ՍԱՐԳՍՅԱՆ, Գ.Ս. ԿԱՐԱԽԱՆՅԱՆ,
Տ.Ս. ԱԶԱՏՅԱՆ, Մ.Ս. ՍԱԿԱՆՅԱՆ, Ա.Կ. ԿՈՍՏԱՆՅԱՆ

Աշխատանքում ուսումնասիրվել է ուլտրաձայնային ազդեցության ներազդեցությունը սինթետիկ աղամանի սերմառ ձևավորման և աճի գործնրացների վրա բարձր ձնշման և ջերմաստիճանի (HPHT) պայմաններում: Ցույց է տրվել, որ մոտ 100 կՀց հաճախականության և 1.5–2.5 մկմ ամպլիտուդի ակուստիկ դաշտը հանգեցնում է գրաֆիտ → աղամանդ փուլային անցման էներգետիկ արգելքի զգալի նվազմանը, կայուն սերմառի ձևավորման արագացմանը և աճի կինետիկայի բարելավմանը: Լաբորատոր ուսումնասիրության տվյալները վկայում են աղամանի ելքի աճի, մոնորխուրեղացման բարձրացման և կառուցվածքային թերությունների նվազման մասին ուլտրաձայնային խթանման դեպքում: Դինդ ֆազայում և միջֆազային շրջանում ընթացող գործնրացների վերլուծության հիման վրա առաջարկվել է ակուստիկ խթանմամբ պայմանավորված փուլային անցման ֆիզիկա-մաթեմատիկական մոդել, որը հաշվի է առնում սերմառի կրիտիկական շառավիկի դինամիկ փոփոխությունը, արգելքի ΔG^* նվազումը, դիֆուզիայի ուժեղացումը և բյուրեղի դրավորման արդյունավետության բարձրացումը: Արդյունքները հաստատում են ուլտրաձայնային խթանման կիրառելիությունը որպես HPHT աղամանի սինթեզի կառավարվող ինտենսիվացման և աճող բյուրեղների կառուցվածքի օպտիմացման արդյունավետ միջոց:

ACOUSTIC STIMULATION OF THE NUCLEATION AND GROWTH OF SYNTHETIC DIAMONDS WITHIN THEIR THERMODYNAMIC STABILITY FIELD

A.N. AVAGYAN, S.M. YAYLOYAN, K.A. SARGSYAN, G.S. KARAKHANYAN,
T.S. AZATYAN, M.S. SAKANYAN, A.K. KOSTANYAN

The study investigates the effect of ultrasonic exposure on the nucleation and growth processes of synthetic diamond under high-pressure, high-temperature (HPHT) conditions. It is shown that an acoustic field in the frequency range around 100 kHz and with amplitudes of about 1.5–2.5 μm leads to a significant reduction of the energy barrier for the graphite → diamond phase transition, accelerates the formation of a stable nucleus, and improves growth kinetics. Experimental data demonstrate an increase in diamond yield, enhanced monocrystallinity, and reduced structural defectiveness under ultrasonic stimulation. Based on an analysis of processes in the solid phase and at the interphase boundary, a physical–mathematical model of the acoustically stimulated phase transition is proposed, accounting for the dynamic change in the critical nucleus radius, the reduction of the barrier ΔG^* , the enhancement of diffusion, and the increased efficiency of crystal doping with impurities. The results confirm the promise of ultrasonic stimulation as a tool for controlled intensification of HPHT diamond synthesis and for optimizing the structure of growing crystals.

Известия НАН Армении, Физика, т.60, №4, с.541–548 (2025)

УДК 536.2

DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.4-541

ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ ОДИНОЧНЫХ ФОТОНОВ В ОБЛАСТИ ЭКСТРЕМАЛЬНОГО УЛЬТРАФИОЛЕТА, РАБОТАЮЩИЙ ПРИ ТЕМПЕРАТУРЕ КИПЕНИЯ ЖИДКОГО ГЕЛИЯ

А.А. КУЗАНЯН*, А.С. КУЗАНЯН, Л.Г. МГЕРЯН, В.Р. НИКОГОСЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: astghik.kuzanyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 25 августа 2025 г.)

Представлены результаты анализа возможности детектирования одиночных фотонов экстремального ультрафиолетового диапазона с помощью многослойного термоэлектрического сенсора с рабочей температурой 4.2 К. Сенсор с площадью поверхности 1 или 100 мкм² состоит из поглотителя (W), теплоотвода (Mo) и диэлектрической подложки (Al₂O₃) с толщинами 40, 10 и 100 нм, соответственно. Толщина термоэлектрического слоя (CeB₆) составляла 5 и 10 нм. Определена эквивалентная мощность шума сенсора. Для расчета эффективности регистрации фотонов с энергией 22.5, 38, 39 и 44.7 эВ методом компьютерного моделирования исследованы процессы распространения тепла в рассматриваемом сенсоре после поглощения фотонов в центре поверхности поглотителя и определена мощность сигнала. С помощью полученных результатов проведена оценка эффективности термоэлектрического сенсора предложенных конструкций при рабочей температуре 4.2 К.

1. Введение

Однофотонные детекторы различных конструкций нашли широкое применение в многочисленных областях науки и современных технологий [1–4]. Детекторы с высокими характеристиками используются для исследований в ИК [5, 6] и УФ диапазонах [7, 8] электромагнитного спектра. Также существуют детекторы для регистрации фотонов в диапазоне экстремального ультрафиолета (ЭУФ) [9], который интересен для микроскопии наномасштабного разрешения [10]. Последние десятилетия среди детекторов различных конструкций наиболее высокими характеристиками обладают сверхпроводящие нанопроволочные однофотонные детекторы [11]. Они обладают высокой системной эффективностью, скоростью счета, низкой скоростью темнового счета и задержкой сигнала [12, 13]. Наиболее важный параметр однофотонных детекторов – системная эффективность детектирования, может достигать 98% для фотонов с длиной волны 1550 нм [14]. Важным параметром детекторов является также рабочая температура. Чем она выше, тем дешевле становится эксплуатация детектора с использованием более простого криогенного оборудования. Из-за сложности поддержания низкой температуры в течение длительного времени исследования

в настоящее время сосредоточены на использовании сверхпроводников на основе купратов с высокой температурой перехода [15].

Термоэлектрический однофотонный детектор обладает рядом преимуществ по сравнению со сверхпроводящими детекторами, основными из которых являются простая конструкция детектирующего элемента и нестрогие требования к поддержанию рабочей температуры [16–18]. Наши предыдущие исследования показали, что отношение сигнал/шум (SNR) термоэлектрического сенсора с вольфрамовым поглотителем и молибденовым теплоотводом может быть значительно больше единицы для фотонов ультрафиолетовой области электромагнитного спектра [19–21]. Это означает, что такой сенсор может обеспечить регистрацию уже поглощенного фотона с высокой эффективностью. В нашей последней работе [22] показано, что при рабочих температурах 0.5–1.5 К сенсора $W/(La,Ce)B_6/Mo/Al_2O_3$ системная эффективность регистрации одиночных фотонов с энергией 22.5, 38 и 44.7 эВ может достигать соответственно 95, 94 и 97 %. Целью настоящей работы является определение системной эффективности термоэлектрического сенсора $W/CeB_6/Mo/Al_2O_3$ в ЭУФ области спектра при рабочей температуре 4.2 К.

2. Методы исследований

Исследовалась возможность детектирования одиночных фотонов с энергией 22.5, 38, 39 и 44.7 эВ с использованием многослойного термоэлектрического сенсора WCM, состоящего из поглотителя (W), термоэлектрического слоя CeB_6 , теплоотвода (Mo) и диэлектрической подложки (Al_2O_3). Сенсор с рабочей температурой $T_o = 4.2$ К имел поверхность A площадью 1×1 и 10×10 мкм². Толщина слоев сенсора составляла: W – 40, CeB_6 – 10 и 5, Mo – 10 и Al_2O_3 – 100 нм. Такая геометрия сенсора обеспечивает как высокую эффективность оптической связи ЭУФ фотонов и сенсора, так и высокую эффективность поглощения фотонов в вольфраме [22]. Эффективность регистрации уже поглощенного фотона зависит от отношения мощности сигнала и шума термоэлектрического сенсора. Мощность сигнала сенсора зависит от возникающего на нем электрического напряжения. Значения возникающего на сенсоре напряжения определяются произведением коэффициента Зеебека термоэлектрика и возникающего на сенсоре градиента температуры. Коэффициент Зеебека термоэлектрика CeB_6 при 4.2 К выше, чем у $La_{0.99}Ce_{0.01}B_6$, поэтому в качестве материала термоэлектрического слоя выбран гексаборид церия.

С целью определения мощности сигнала на основе уравнения теплопередачи из ограниченного объема проводилось компьютерное моделирование процессов распространения тепла в термоэлектрическом сенсоре. Методика расчетов, уравнения и приближения подробно описаны в работе [19]. Определены временные зависимости температуры в зоне термализации фотона, в центре границ слоев и в 10 точках на каждой границе с одинаковым шагом от центра. Также определена временная зависимость усредненной по поверхности слоев температуры. В табл.1 приведены физические параметры материалов, которые использованы в расчетах мощности шума и сигнала.

Табл.1. Физические параметры материалов при 4.2 К

Параметры	Материалы			
	W	CeB ₆	Mo	Al ₂ O ₃
Плотность, кг/м ³	19300	4800	10280	4000
Теплоемкость, Дж/(кг×К)	0.038 [23]	14.64 [26]	0.1 [29]	0.0078 [30]
Теплопроводность, Вт/(м×К)	5880 [24]	0.25 [27]	63.8 [24]	256 [31]
Коэффициент Зеебека, мкВ/К		90 [28]		
Удельное сопротивление, Ом×м	3×10 ⁻¹³ [25]	6×10 ⁻⁷ [28]	7.3×10 ⁻¹² [25]	

3. Результаты и их обсуждение

Как показано в работе [22], вольфрамовый поглотитель толщиной 40 нм обеспечивает высокую эффективность оптической связи с сенсором и поглощение фотонов рассматриваемых энергий. Для расчета системной эффективности WCM сенсора при рабочей температуре 4.2 К нужно определить эффективность регистрации уже поглощенного фотона, которую можно считать высокой, если выполняется условие $SNR > 1$. Значения параметра SNR определим для всех рассматриваемых энергий фотонов и геометрий WCM сенсора. Начнем рассмотрение полученных результатов с определения эквивалентной мощности шума.

3.1. Эквивалентная мощность шума

Эквивалентная мощность шума N сенсора оптического излучения определяется как мощность падающего излучения, обеспечивающая отношение сигнал/шум, равное единице на выходе сенсора. Обычно рассматривается квадрат эквивалентной мощности шума на единицу полосы пропускания $NEP^2 = N^2/\Delta f$, следовательно NEP имеет единицу измерения Вт/Гц^{1/2}. Полоса пропускания Δf является обратной величиной времени измерения сигнала $\Delta f = 1/t$. Для тепловых детекторов NEP обусловлена главным образом фононным (NEP_p) и Джонсоновским (NEP_J) шумом [32–34], которые для многослойного термоэлектрического сенсора определяются уравнениями [35]

$$NEP_p^2 = 4k_B T^2 (4A\varepsilon\sigma_{SB}T^3 + k_3 d_3),$$

$$NEP_J^2 = \frac{4k_B T (\rho_1 d_1 + \rho_2 d_2) (4A\varepsilon\sigma_{SB}T^3 + k_1 d_1 + k_2 d_2)^2}{A|S|^2}.$$

В этих уравнениях k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, A – площадь поверхности сенсора, ε – поглощающая способность поглотителя, σ_{SB} – постоянная Стефана–Больцмана, k_3 – теплопроводность материала теплоотвода, d_3 – толщина теплоотвода, S – коэффициент Зеебека материала термоэлектрического слоя; ρ_1 , d_1 , k_1 обозначают соответственно удельное сопротивление, толщину и теплопроводность поглотителя, а ρ_2 , d_2 , k_2 относятся к тем же параметрам термоэлектрического слоя. Фононный шум обусловлен процессом теплопередачи из поглотителя и термоэлектрического слоя через теплоотвод в подложку и

зависит от геометрии и физических свойств материала теплоотвода. Джонсоновский шум обусловлен флуктуациями носителей заряда в поглотителе и термоэлектрическом слое и зависит от параметров этих двух слоев. Суммарный шум рассчитывается по уравнению $NEP = (NEP_p^2 + NEP_J^2)^{1/2}$. Эквивалентная мощность шума сенсора WCM с площадью поверхности 100 и 1 $\mu\text{м}^2$, рабочей температурой 4.2 К для двух значений толщины термоэлектрического слоя d_2 приведена в табл.2.

Табл.2. Эквивалентная мощность шума сенсора WCM с поверхностью 1 и 100 $\mu\text{м}^2$

d_2 , нм	NEP _p	NEP _J	NEP	NEP _p	NEP _J	NEP
	Вт/Гц ^{1/2}					
	$A = 100 \mu\text{м}^2$			$A = 1 \mu\text{м}^2$		
5	2.49×10^{-14}	2.18×10^{-13}	2.19×10^{-13}	2.49×10^{-14}	2.18×10^{-12}	2.19×10^{-12}
10	2.49×10^{-14}	3.08×10^{-13}	3.09×10^{-13}	2.49×10^{-14}	3.08×10^{-12}	3.08×10^{-12}

Эквивалентный фононный шум не изменяется с изменением площади поверхности сенсора и толщины термоэлектрического слоя. Джонсоновский шум сенсора с поверхностью 1 $\mu\text{м}^2$ на порядок больше, чем у сенсора с поверхностью 100 $\mu\text{м}^2$, больше для сенсора с большей толщиной термоэлектрического слоя, намного больше фононного шума и определяет суммарный шум. Отметим также, что эквивалентная мощность шума термоэлектрического сенсора не зависит от энергии регистрируемых фотонов.

3.2. Моделирование процесса распространения тепла в WCM сенсоре с рабочей температурой 4.2 К

Закономерности распространения тепла в термоэлектрическом сенсоре WCM после поглощения одиночных ЭУФ фотонов аналогичны установленным ранее для многослойных сенсоров других конструкций, одинаковы для поверхностей всех слоев сенсора и различных энергий фотонов [18, 33]. Установлено, что на поверхности слоя максимальная температура достигается в центре, при удалении от которого значения максимума уменьшаются, а время достижения максимума увеличивается. В один и тот же момент времени усредненная температура поверхности слоя тем меньше, чем ближе слой к подложке. Именно этим обусловлено возникновение на термоэлектрическом слое градиента температуры и электрического напряжения – сигнала, позволяющего регистрировать один фотон.

Методом компьютерного моделирования исследовалась временная зависимость градиента усредненной по границам термоэлектрического слоя температуры. На рис.1 приведены графики этой зависимости для случаев поглощения фотонов с различной энергией в сенсоре с толщиной термоэлектрического слоя 10 нм и площадью поверхности 100 $\mu\text{м}^2$. Можно видеть, что градиент усредненной температуры быстро достигает максимума, за которым следует медленный спад, причем, максимум тем выше, чем больше энергия поглощенного фотона. Такие же зависимости наблюдаются и для сенсора с площадью поверхности 1 $\mu\text{м}^2$, но достигаются значительно большие значения максимума. На рис.2 приведены графики временной зависимости градиента усредненной температуры на

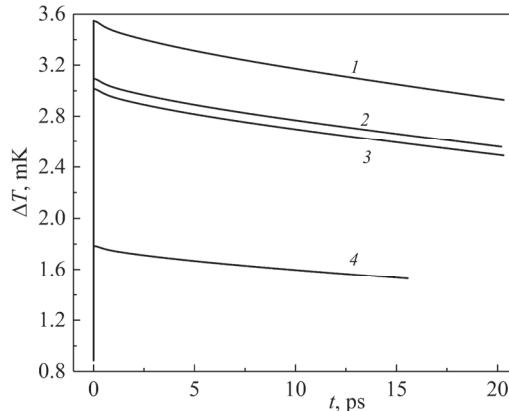


Рис.1. Временная зависимость градиента усредненной температуры, возникающей на сенсоре с поверхностью 100 мкм^2 и толщиной $d_2 = 10 \text{ нм}$ после поглощения фотонов с энергией: 1 – 44.7, 2 – 39, 3 – 38 и 4 – 22.5 эВ.

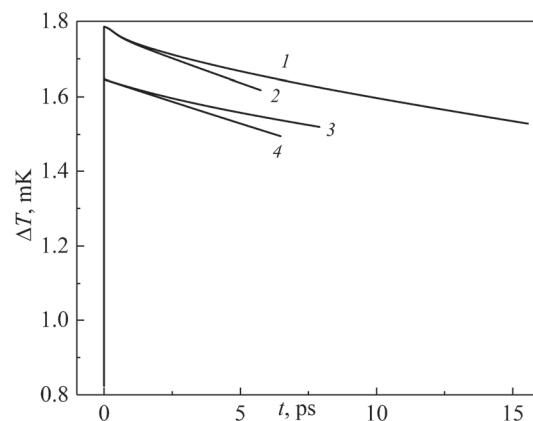


Рис.2. Временная зависимость градиента усредненной температуры, возникающего на сенсоре с поверхностью 100 мкм^2 (1, 2) и уменьшенные в 100 раз значения ΔT для сенсоре с поверхностью 1 мкм^2 (3, 4) при толщине $d_2 = 10 \text{ нм}$ (1, 3) и 5 нм (2, 4) после поглощения фотонов с энергией 22.5 эВ.

термоэлектрическом слое для случаев поглощения фотонов с энергией 22.5 эВ в сенсоре с толщиной термоэлектрического слоя 5 и 10 нм и площадью поверхности 1 и 100 мкм^2 .

Как и следовало ожидать, для одной и той же энергии фотона уменьшение площади поверхности сенсора в 100 раз почти в 100 раз увеличивают градиент усредненной температуры. Уменьшение толщины термоэлектрического слоя в 2 раза мало влияет на значения максимума градиента ΔT_m , но ускоряет спад усредненной температуры на границе поглотитель – термоэлектрический слой и градиента ΔT . Значения параметра ΔT_m и соответствующего ему максимального электрического напряжения, которое рассчитывается по уравнению $V_m = S \times \Delta T_m$, где S – коэффициент Зеебека материала термоэлектрического слоя, приведены в табл.3. Возникающее на сенсоре максимальное электрическое напряжение увеличивается с увеличением энергии поглощенного фотона, и если для сенсора с площадью поверхностью 100 мкм^2 V_m равно сотням нановольт, то для сенсора с

Табл.3. Значения максимумов градиента усредненной температуры и электрического напряжения на границах термоэлектрического слоя сенсора WCM с площадью поверхности 100 и 1 мкм²

E, эВ	A = 100 мкм ²		A = 1 мкм ²	
	ΔT_m , мК	V_m , мкВ	ΔT_m , мК	V_m , мкВ
22.5	1.786	0.16074	166.1	14.949
38	3.016	0.27144	280.4	25.236
39	3.096	0.27864	287.9	25.911
44.7	3.548	0.31932	329.9	29.691

поверхностью 1 мкм² – десяткам микровольт.

3.3. Расчет мощности сигнала, мощности шума и SNR сенсора WCM с рабочей температурой 4.2 K

Мгновенная мощность электрического сигнала устройства с сопротивлением R , на котором возникает напряжение V , равна $P(t) = V^2(t)/R$. Усредненная за период τ мощность сигнала равна $P_s = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau P(t)dt$. Мощность шума в единицах ватт определяется уравнением $P_N = NEP \times \Delta f^{1/2}$, где полоса частот измерения сигнала $\Delta f = 1/\tau$. По определению $SNR = P_s/P_N$. Значения параметров P_N , P_s и SNR сенсора WCM с

Табл.4. Значения параметров P_N , P_s и SNR термоэлектрического сенсора WCM

E, эВ	d_2 , нм	P_N , Вт	P_s , Вт	SNR	P_N , Вт	P_s , Вт	SNR
		$A = 100 \text{ мкм}^2$			$A = 1 \text{ мкм}^2$		
22.5	10	1.17×10^{-7}	3.89×10^{-10}	0.0033	1.17×10^{-6}	1.16×10^{-9}	0.001
	5	8.29×10^{-8}	3.38×10^{-8}	0.41	8.24×10^{-7}	2.03×10^{-7}	0.25
38	10	1.17×10^{-7}	7.61×10^{-10}	0.0065	1.17×10^{-6}	61×10^{-9}	0.002
	5	8.29×10^{-8}	6.61×10^{-8}	0.80	8.24×10^{-7}	1.99×10^{-7}	0.24
39	10	1.17×10^{-7}	2.22×10^{-10}	0.0019	1.17×10^{-6}	61×10^{-9}	0.0013
	5	8.29×10^{-8}	9.65×10^{-8}	1.16	8.24×10^{-7}	1.34×10^{-7}	0.16
44.7	10	1.17×10^{-7}	7.61×10^{-9}	0.0093	1.17×10^{-6}	61×10^{-9}	0.0026
	5	8.29×10^{-8}	9.42×10^{-8}	1.14	8.24×10^{-7}	2.61×10^{-7}	0.32

различной площадью поверхности и толщиной термоэлектрического слоя для случаев поглощения ЭУФ фотонов приведены в табл.4. При расчетах использовались данные моделирования для сигнала продолжительностью 7 пс.

Из таблицы видно, что для большинства рассмотренных случаев $SNR < 1$, т.е. мощность сигнала меньше мощности шума. Только для случаев поглощения фотонов с энергией 39 и 44.7 эВ в сенсоре с поверхностью 100 мкм² и толщиной термоэлектрического слоя 5 нм имеем $SNR > 1$. Однако, как мы показали ранее [22], при более продолжительных сигналах, достаточных для спада сигнала до уровня фона, значения SNR будут меньше. Рассмотренная в данном параграфе

продолжительность сигнала 7 пс не обеспечивает спад сигнала до уровня фона и готовность сенсора регистрировать следующий фотон.

4. Заключение

Представлены результаты компьютерного моделирования процессов распространения тепла в термоэлектрическом WCM сенсоре, состоящем из W поглотителя, Mo теплоотвода и Al_2O_3 подложки, с толщинами 40, 10 и 100 нм, соответственно. Рассматривались два значения толщины термоэлектрического слоя CeB_6 – 5 и 10 нм. Изучено поглощение ЭУФ фотонов в сенсоре с площадью поверхности 1 и 100 мкм^2 . Показано, что в случае регистрации одиночных фотонов с энергией 22.5, 38 и 44.7 эВ при рабочих температурах WCM сенсора 4.2 К значения $\text{SNR} > 1$ могут быть достигнуты, однако высокая эффективность регистрации уже поглощенных фотонов и высокая скорость счета не могут быть достигнуты одновременно. Такими характеристиками обладает $\text{W/La}_{0.99}\text{Ce}_{0.01}\text{B}_6/\text{Mo}/\text{Al}_2\text{O}_3$ сенсор при рабочей температуре в интервале 0.5–1.5 К [22].

Авторы благодарны А.М. Гуляну за интерес к работе и полезные дискуссии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке РА (проект № 1–6/ИФИ).

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **S. Dong, D.M.Z. Koh, F. Martinelli, P.J.E. Brosseau, M. Petrovic, L. Shen, G. Adamo, A.N. Vetrugini, M. Sidorova, C. Kurtsiefer, C. Soci.** *Sci Rep*, **14**, 30891 (2024).
2. **H. Hao, QY. Zhao, YH. Huang, J. Deng, F. Yang, SY. Ru, Z. Liu, C. Wan, H. Liu, ZJ. Li, HB. Wang, XC. Tu, LB. Zhang, XQ. Jia, XL. Wu, J. Chen, L. Kang, PH. Wu.** *Light Sci. Appl.*, **13**, 25 (2024).
3. **R. Hadfield.** *Nat. Photon.*, **3**, 696 (2009).
4. **D. Cornwell.** *Opt. Photonics News*, **27**, 24 (2016).
5. **A.W. Elshaari, W. Pernice, K. Srinivasan, O. Benson, V. Zwiller.** *Nat. Photonics*, **14**, 285 (2020).
6. **F. Gardes, A. Shooa, G. De Paoli, I. Skandalos, S. Ilie, T. Rutirawut, W. Talataisong, J. Faneca, V. Vitali, Y. Hou, T. Bucio, I. Zeimpekis, C. Lacava, P. Petropoulos.** *Sensors (Basel)*, **22**, 4227 (2022).
7. **S. Gyger, J. Zichi, L. Schweickert, A.W. Elshaari, S. Steinhauer, S.F. Covre da Silva, A. Rastelli, V. Zwiller, K.D. Jöns, C. Errando-Herranz.** *Nat. Commun.*, **12**, 1408 (2021).
8. **Y. Dai, K. Jia, G. Zhu, H. Li, Y. Fei, Y. Gu, H. Yuan, H. Wang, X. Jia, Q. Zha, L. Kang, J. Chen, S-n. Zhu, P. Wu, Z. Xie, L. Zhang.** *PhotoniX*, **4**, 7 (2023).
9. **S. Fuchs, J.J. Abel, J. Nathanael, J. Reinhard, F. Wiesner, M. Wünsche, S. Skruszewicz, C. Rödel, D. Born, H. Schmidt, G.G. Paulus.** *Appl. Phys. B*, **128**, 26 (2022).
10. **F. Wiesner, M. Wünsche, J. Reinhard, J.J. Abel, J. Nathanael, S. Skruszewicz, C. Rödel, S. Yulin, A. Gawlik, G. Schmidl, U. Hübner, J. Plentz, G.G. Paulus, S. Fuchs.** *Optica*, **8**, 230 (2021).
11. **R.H. Hadfield, J. Leach, F. Fleming, D.J. Paul, C.H. Tan, J.S. Ng, R.K. Henderson, G.S. Buller.** *Optica*, **10**, 1124 (2023).
12. **Q. Chen, F. Zhou, C. Wei, Y. Dai, H. Gan, L. Zhang, H. Wang, H. Yuan, H. Li, J. Tan, G. Feng, X. Tu, X. Jia, Q. Zhao, L. Kang, J. Chen, P. Wu.** *National Science Review*, **12**,

- 319 (2025).
13. **F.P. Venza, M. Colangelo.** APL Photon., **10**, 040901 (2025).
 14. **D.V. Reddy, R.R. Nerem, S.W. Nam, R.P. Mirin, V.B. Verma.** Optica, **7**, 1649 (2020).
 15. **S. Tripathy, K. Tyagi, P. Pratap.** iScience, **27**, 110779 (2024).
 16. **A. Gulian, K. Wood, D. Van Vechten, G. Fritz.** J. Mod. Opt., **51**, 1467 (2004).
 17. **A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan.** Opt. Eng., **63**, 017105 (2024).
 18. **A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan.** IEEE Sens. J., **20**, 3040 (2020).
 19. **A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan.** IEEE Sens. J., **20**, 12776 (2020).
 20. **A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, L.G. Mheryan, A.S. Kuzanyan.** J. Contemp. Phys., **59**, 323 (2024).
 21. **A.A. Kuzanyan, A.S. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, L.G. Mheryan, V.T. Tatoyan, V.S. Kuzanyan, G.R. Badalyan.** J. Contemp. Phys., **60**, 62 (2025).
 22. **A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, L.G. Mheryan, A.S. Kuzanyan.** J. Contemp. Phys., **60**, (2025), p. 405.
 23. **G.K. White, S.J. Collocott.** J. Phys. Chem. Ref. Data, **13**, 1251 (1984).
 24. **C.Y. Ho, R.W. Powell, P.E. Liley.** J. Phys. Chem. Ref. Data, **3**, 689 (1974).
 25. **P.D. Desai, T.K. Chu, H.M. James, C.Y. Ho.** J. Phys. Chem. Ref. Data, **13**, 1069 (1984).
 26. **Y. Peysson, C. Ayache, B. Salce, J. Rossat-Mignod, S. Kunii, T. Kasuya.** J. Magn. Magn. Mater., **47&48**, 63 (1985).
 27. **Y. Peysson, C. Ayache, B. Salce.** J. Magn. Magn. Mater., **59**, 33 (1986).
 28. **V. Petrosyan, V. Vardanyan, V. Kuzanyan, M. Konovalov, V. Gurin, A. Kuzanyan.** Solid State Sci., **14**, 1653 (2012).
 29. **P.D. Desai.** J. Phys. Chem. Ref. Data, **16**, 91 (1987).
 30. **G.T. Furukawa, T.B. Douglas, R.E. McCoskey, D.C. Ginnings.** J. Res. Nat. Bur. Stand., **57**, 67 (1956).
 31. **M.W. Wolfmeyer, J.R. Dillinger.** Phys. Lett., **34A**, 247 (1971).
 32. **U. Dillner, E. Kessler, H.-G. Meyer.** J. Sens. Sens. Syst., **2**, 85 (2013).
 33. **J.C. Mather.** Appl. Opt., **21**, 1125 (1982).
 34. **P.L. Richards.** J. Appl. Phys., **76**, 1 (1994).
 35. **A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan.** Opt. Eng., **63**, 067102 (2024).

THERMOELECTRIC SENSOR FOR REGISTRATION OF SINGLE PHOTONS
IN THE EXTREME ULTRAVIOLET REGION, OPERATING
AT THE BOILING POINT OF LIQUID HELIUM

A.A. KUZANYAN, A.S. KUZANYAN, L.G. MHERYAN, V.R. NIKOGHOSYAN

We present the results of the analysis of the possibility of detecting single photons of the extreme ultraviolet range using a multilayer thermoelectric sensor with an operating temperature of 4.2 K. The sensor with a surface area of 1 or 100 μm^2 consists of an absorber (W), a thermoelectric layer (CeB₆), a heat sink (Mo) and a dielectric substrate (Al₂O₃) with thicknesses of 40, 10 or 5, 10 and 100 nm, respectively. The equivalent noise power of the sensor is determined. To calculate the efficiency of detecting photons with energies of 22.5, 38, 39 and 44.7 eV, the processes of heat propagation in the considered sensor after absorption of photons in the center of the absorber surface are studied by computer simulation and the signal power is determined. Using the obtained results, the efficiency of the thermoelectric sensor of the proposed designs at an operating temperature of 4.2 K is assessed.

Известия НАН Армении, Физика, т.60, №4, с.549–558 (2025)

УДК 535.544.546.5

DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.4-549

ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ И РАДИАЦИОННО-ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАСИЛИКАТА КАДМИЯ, ПОЛУЧЕННОГО МИКРОВОЛНОВЫМ МЕТОДОМ

А.А. САРГСЯН¹, Т.С. АЗАТЯН^{1*}, Е.М. АЛЕКСАНЯН², Н.Б. КНЯЗЯН¹,
Т.В. ГРИГОРЯН¹, А.А. КАЗАРЯН¹, А.А. ПЕТРОСЯН¹, В.В. АРУТЮНЯН²,
А.О. БАДАЛЯН², С.С. ПИРУМОВ³, В.В. БАГРАМЯН¹

¹Институт общей и неорганической химии им М.Г. Манвеляна
НАН РА, Ереван, Армения

²Национальная научная лаборатория имени А.Алиханяна,
Ереванский физический институт, Ереван, Армения

³Институт химической физики им А.Б. Налбандяна НАН РА, Ереван, Армения

*e-mail: tatiana.azatian@gmail.com

(Поступила в редакцию 10 октября 2025 г.)

Разработан гидротермально-микроволновый метод синтеза метасиликата кадмия из водорастворимых соединений кадмия и силиката натрия, показана эффективность данного метода по сравнению с традиционным нагревом. Синтезированный продукт, метасиликат кадмия, является нанодисперсным порошком, имеет высокую фотокаталитическую активность и радиационную стойкость. Физико-химические характеристики синтезированного метасиликата кадмия были исследованы методами дифференциального-термического анализа, рентгенофазового анализа, UV-VIS и ИК-спектроскопии, а также электронной микроскопии. Результаты показали, что ширина запрещённой зоны (E_g) полученного порошка в зависимости от температуры обработки и воздействия протонного облучения, изменяется в пределах 5.06–5.46 эВ. Полученный предложенным методом материал может применяться в качестве диэлектрика, фотокатализатора и для защиты от ионизирующего излучения.

1. Введение

Большой интерес к силикатам кадмия обусловлен их ценными физико-химическими свойствами. Силикаты кадмия, благодаря своим специфическим свойствам, в настоящее время получили широкое применение: для получения оптического стекла, ИК-прозрачных стекол, электронных компонентов и защитного материала для гамма-излучения в качестве основы оптических преобразователей [1–3]; в последнее время используется в качестве эффективных люминесцентных материалов [4–8]. Синтезированная наноструктура Cd_2SiO_4 с оптимизированными размерами и морфологией, а также нанокомпозит Cd_2SiO_4 /графен впервые предложены в качестве электрохимического материала для хранения водорода [9].

Одна из важнейших задач современной неорганической химии и материаловедения – разработка новых методов синтеза веществ, позволяющих снизить

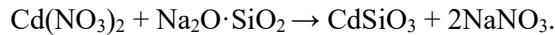
энергозатраты и сократить время получения целевых конечных продуктов. К таким перспективным методам относится гидротермально-микроволновый (ГТМВ) метод синтеза материалов, в том числе и при синтезе силикатов кадмия. Микроволновый (МВ) синтез метасиликата кадмия из водных растворов силиката натрия и растворимых солей кадмия наиболее перспективен, прост в осуществлении и экономичен в сравнении с известными, как традиционными, так и методами сжигания, осаждения и золь-гель методами [4–16]. МВ синтез – эффективный способ получения неорганических материалов благодаря равномерному и быстрому нагреву, контролю за временем процесса, а также условиям высокой чистоты процесса [17–22]. Концентрация энергии микроволн может быть использована также при термообработке синтезированных продуктов, где высокая степень упаковки структурных мотивов может быть достигнута в короткие времена, сохраняя размеры зерен в нанопределах.

Цель работы – разработка ГТМВ метода синтеза метасиликата кадмия из водных растворов и исследование радиационно-оптических и фотокаталитических свойств синтезированных материалов.

2. Экспериментальная часть

2.1. Получение метасиликата кадмия

Для синтеза использовали нитрат кадмия $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2$ марки х. ч. и очищенный от красящих примесей раствор метасиликата натрия $\text{Na}_2\text{O}\cdot\text{SiO}_2$, который был получен ГТМВ обработкой кремнезёма содержащих горных пород. Очистку силикатного раствора от красящих примесей (соединений железа и др.) осуществляли способом, разработанным нами [17]. Концентрации исходных водных растворов $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2$ и $\text{Na}_2\text{O}\cdot\text{SiO}_2$ составляли 0.5 моль/л. Количества исходных реагентов рассчитаны согласно реакции:



Синтез метасиликата кадмия осуществляли в микроволновой печи (CE1073AR, Samsung) в открытой стеклянной колбе, снабженной обратным холодильником и мешалкой. Условия синтеза: частота микроволн 2.45 ГГц, температура 95–100°C, давление атмосферное, время 30 мин. Синтез осуществляли взаимодействием растворов нитрата кадмия и метасиликата натрия, поддерживая pH среды 7.0. После выдержки 30 мин осадок фильтровали и тщательно отмывали от ионов Na^+ и NO_3^- горячей водой путем репульпации, после чего высушивали при температуре 100°C. После сушки проводили термообработку метасиликата кадмия в электрической печи (LHT 08/17, Nabertherm) при различных температурах в течение двух часов. Для установления образовавшихся фаз проведены рентгенофазовые анализы (РФА) термообработанных образцов.

2.2. Методы анализа

Состав исходных и конечных продуктов определяли физико-химическими методами анализа (весовым, спектроскопическим, фотоколориметрическим, пламенно-фотометрическим). РФА проводили порошковым методом на

дифрактометре URD 63, с источником излучения СuKa. Дифференциальный термический (ДТА) и термогравиметрический (ТГ) анализы – на приборе Дериватограф Q 1500. Диффузное отражение CdSiO_3 и оптическую плотность растворов метиленового синего (МС) определяли на спектрометре Cary 60, оснащённом интегрирующей насадкой DRA Barrelino. ИК-спектры пропускания образцов в области 400–4000 cm^{-1} измерялись на спектрометре Cary 630. Микроструктуру образцов изучали электронно-микроскопическим анализом на приборе SEM Magellan 400 (FEI). Радиационную стойкость образцов изучали в условиях облучения протонами, которое проводилось в Центре производства радиоизотопов (Ереван, Армения) с использованием Циклотрона С-18. Фотокаталитическую активность метасиликата кадмия определяли реакцией деградации МС под УФ облучением. Исходная концентрация МС составляла 10 мг/л, количество раствора МС 100 мл, количество катализатора 100 мг, время УФ облучения 10–60 мин. Реакцию разложения проводили со свободным доступом воздуха. Для получения гомогенной массы раствор с катализатором перемешивали магнитной мешалкой в течение 30 мин в темноте и полученную суспензию облучали УФ-лампой Navigator. Каждые 10 мин брали пробы (около 2 мл), центрифугировали и анализировали. Концентрацию МС до и после облучения в присутствии катализатора определяли измерением оптической плотности центрифугата при 664 нм, при максимальном поглощении излучения. Определение концентрации МС производилось на основе экспериментальной калибровочной прямой.

3. Результаты и их обсуждение

Химический анализ показал, что состав полученного метасиликата кадмия соответствует формуле $\text{CdSiO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$, влажность 68–70%, а после сушки 8–10% и представляет собой белый, после сушки частично закристаллизованный тонкодисперсный порошок.

Результаты термического анализа высушенных образцов $\text{CdSiO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ приведены на рис.1. Эндотермические эффекты обусловлены постепенным удалением воды. Широкий температурный интервал удаления воды указывает на

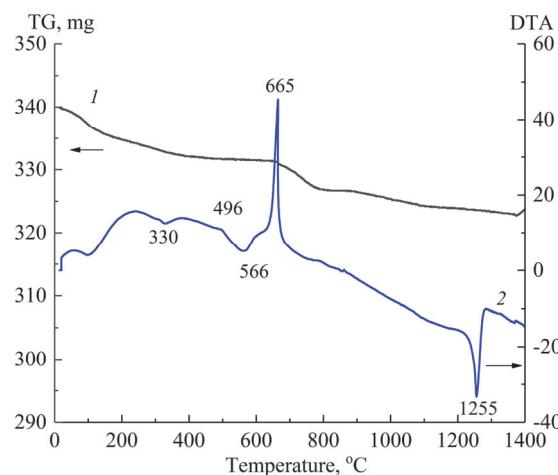


Рис.1. Дифференциальные термические кривые образца $\text{CdSiO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$:
1 – TG и 2 – DTA.

то, что вода в синтезированных гидросиликатах находится в структурно неэквивалентных позициях. Как видно из приведённой термограммы, в режиме непрерывного повышения температуры до 800°C исследуемый образец теряет абсорбированную воду, что приводит к перестройке структуры. Анализ кривых потерь массы образцов указывает на то, что структурно связанная вода удаляется при более высоких температурах. Потеря массы образца вследствие удаления OH групп происходит до температуры 1300°C. Экзоэффект при 665°C обусловлен твёрдофазным превращением, т.е. кристаллизацией образца. При 1255°C силикат кадмия плавится (эндотермический эффект).

Чтобы оценить влияние термообработки на структуру метасиликата кадмия, проведена двухчасовая термообработка при температурах 100, 650, 900°C. На рис.2 показаны рентгенограммы этих образцов.

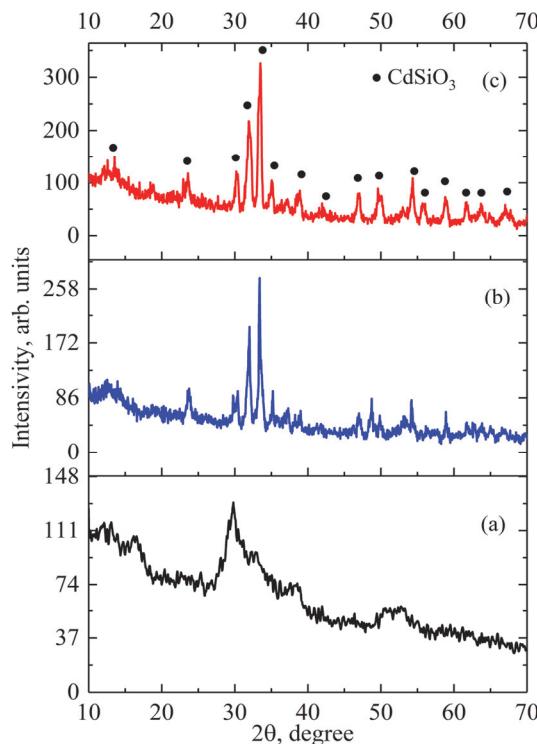


Рис.2. Рентгенограммы метасиликата кадмия, синтезированного МВ методом и термообработанного в течении 2 ч при температурах (а) 100, (б) 650, (с) 900°C.

В образце, термообработанном при 100°C наблюдается преобладание аморфной фазы. С ростом температуры обработки вырисовывается кристаллическая фаза: так при 650 и 900°C образцы имеют одинаковый кристаллический состав CdSiO₃ (JCPDS: 35–0810). Различие интенсивностей рентгенограмм (рис.2б и 2с) обусловлено неполной кристаллизацией силиката кадмия при 650°C.

На рис.3 показаны ИК спектры образцов метасиликата кадмия, обработанных при температуре 100°C (кривая 1) и 900°C (кривая 2). Полосы поглощения при 3528 и 1625 cm^{-1} обусловлены модами валентных и

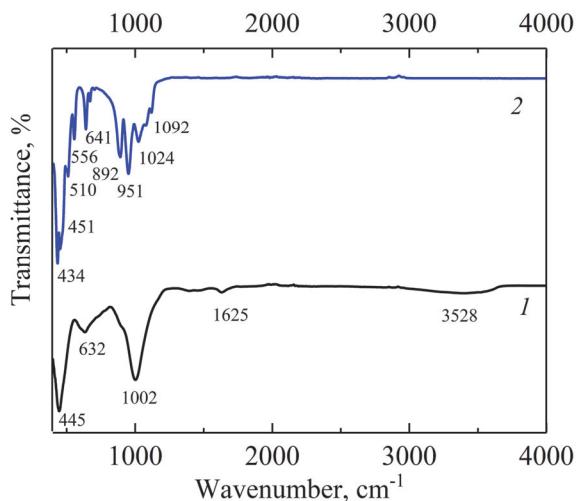


Рис.3. ИК спектры метасиликата кадмия, термообработанного в течении 2 ч при температурах 100 (кривая 1) и 900°C (кривая 2).

деформационных колебаний OH групп воды соответственно; полосы 1024 и 1092 cm^{-1} обусловлены асимметричным валентным колебанием связи Si—O—Si и колебанием растяжения связи Si—O. Пики при 434, 451, 510, 556 и 641 cm^{-1} являются характерными для деформационных колебаний мостиков Si—O—Si. Полоса поглощения с максимумом 1002 cm^{-1} на аморфном образце (кривая 1) приписывается связи Si—O, которая существует в метасиликатной группе SiO_3^{2-} . В кристаллическом образце перемещение пика в низкочастотную область 892 и 951 cm^{-1} (кривая 2) обусловлено ослаблением связи Si—O вследствие образования более прочной связи O—Cd в метасиликате CdSiO_3 .

Полученные сканирующим электронным микроскопом (СЭМ) снимки (рис.4) синтезированного материала показывают, что частицы по размерам однородные и имеют сферическую форму (рис.4а). С ростом температуры обработки образцов частицы растут перпендикулярно к поверхности, приобретая удлинённую форму (рис.4б).

Из рентгенограммы по методу Шерпера рассчитаны размеры частиц: при

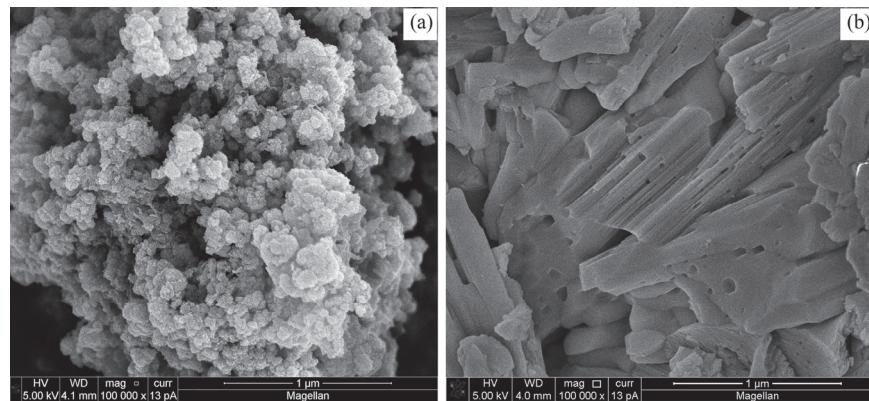


Рис.4. СЭМ снимки метасиликата кадмия, термообработанного в течении 2 ч при температурах (а) 100 и (б) 900°C.

100°C – 15–20 нм (удельная поверхность $S = 250$ –300 м²/г), при 900°C – 56–60 нм ($S = 60$ м²/г). Эти данные согласуются с результатами СЭМ анализа.

Измерены коэффициенты диффузного отражения образцов CdSiO₃ в области 200–900 нм (рис.5а). Видно, что синтезированный МВ методом силикат кадмия имеет высокую отражательную способность ($\geq 90\%$) в видимой области спектра. Из спектров диффузного отражения были получены спектры поглощения с использованием функции Кубелки–Мунка $F(R) = (1 - R)^2/2R$ (рис.5б). Следуя признанной в оптике порошков методике, были построены зависимости $(F(R)hv)^2$ от энергии излучения hv (рис.5с) и экстраполяцией их линейного участка до пересечения с осью hv определены значения E_g . Для образцов, термообработанных при 100 и 900°C значения ширины запрещённой зоны E_g

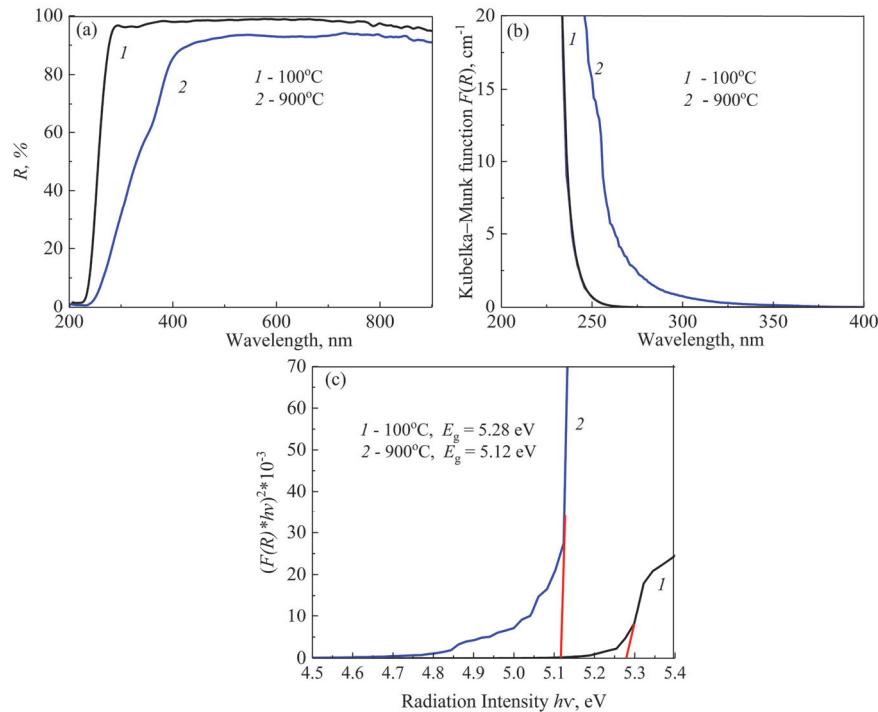


Рис.5. Спектральные характеристики образцов CdSiO₃, термообработанных при 100°C (кривые 1) и 900°C (кривые 2): (а) спектры диффузного отражения; (б) пересчитанные спектры поглощения (функция Кубелки–Мунка $F(R)$); (с) зависимость $(F(R)hv)^2$ от энергии излучения hv .

равны 5.28 и 5.12 эВ, соответственно. Результаты согласуются с данными, полученными в [23].

Изучена радиационная стойкость полученного CdSiO₃ при воздействии протонного излучения. Использовался пучок протонов с энергией 15.5 МэВ. Средняя плотность потока протонов поддерживалась на уровне 10^{14} протон/см², ~1 мкА, 50 с. Спектральные характеристики образцов CdSiO₃, термообработанных при 100 и 900°C и подвергенных воздействию протонного облучения, представлены на рис.6. Из сравнивая рис.5а и рис.6а видно, что диффузная отражательная способность силиката кадмия, термообработанного при 900°C и имеющего кристаллическую структуру, уменьшается (~20%), в то время как

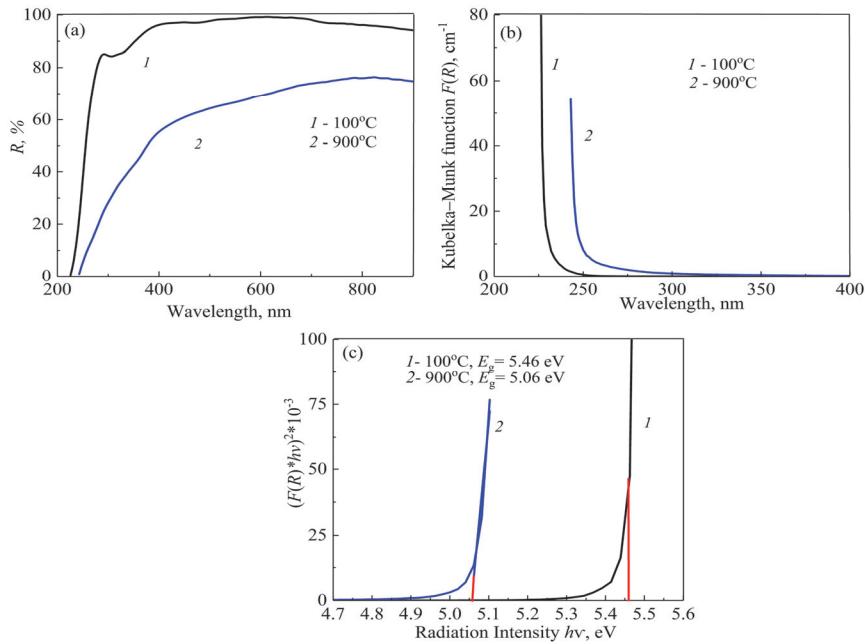


Рис.6. Спектральные характеристики образцов CdSiO_3 , подверженных воздействию протонного облучения и термообработанных при 100°C (кривые 1) и 900°C (кривые 2): (а) спектры диффузного отражения; (б) пересчитанные спектры поглощения (функция Кубелки–Мунка $F(R)$); (с) зависимость $(F(R) \cdot h\nu)^2$ от энергии излучения $h\nu$.

термообработанный при 100°C аморфный силикат кадмия проявляет более высокую радиационную стойкость. Значения ширины запрещенной зоны E_g полученных образцов, термообработанных при 100 и 900°C после облучения протонами равны 5.46 и 5.06 эВ, соответственно. Результаты РФА показали, что образцы после облучения протонами сохраняют кристаллическую структуру.

Катализическая активность полученного силиката кадмия изучена по реакции разложения МС при УФ-облучении. Конверсия МС определена оптическим методом. На рис.7 представлены оптические плотности растворов МС при различных значениях длины волны спектра до и после УФ облучения.

В присутствии синтезированного CdSiO_3 превращение МС под УФ облучением достигает 85 – 93% через 50 – 100 мин облучения. Реакция разложения МС на синтезированном катализаторе практически завершается за 60 мин под УФ облучением. Экспериментальные данные фотокаталитического разложения МС под УФ излучением показывают, что синтезированный аморфный метасиликат кадмия обладает более высокой фотокаталитической активностью.

Фотокаталитическое разложение МС на поверхности катализатора можно объяснить следующим механизмом. Процесс гетерогенного фотокаталитического разложения вещества в водной среде можно условно разделить на следующие этапы: перенос вещества из водной среды на поверхность фотокатализатора; адсорбция вещества; фотокаталитическое разложение адсорбированного вещества; десорбция и удаление продуктов разложения с поверхности фотокатализатора [1–5]. При действии УФ-излучения на фотокатализатор с энергией равной или большей ширины запрещенной зоны

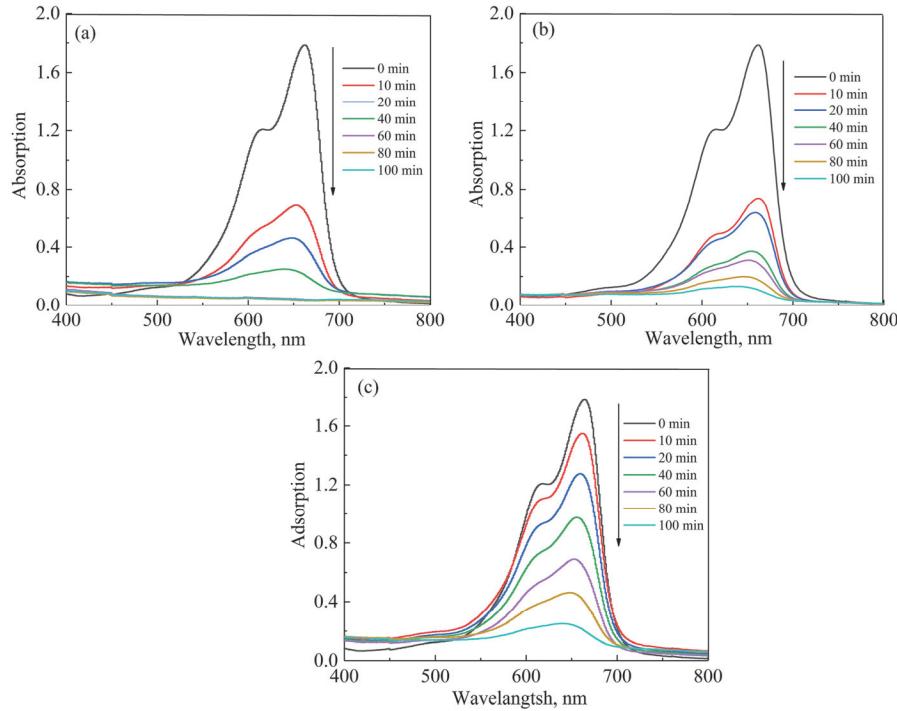
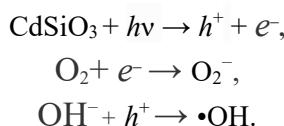
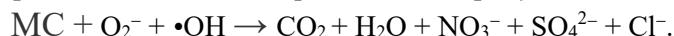


Рис.7. Зависимость оптической плотности раствора МС от длины волны при различных временах его фотокаталитической деградации, содержание катализатора CdSiO_3 100 мг, образцы обработаны при температурах (а) 100, (б) 650, (с) 900°C.

происходит генерация электронно-дырочной пары (e^- и h^+). Фотогенерированные положительные дырки валентной зоны реагируют с адсорбированной водой либо гидроксогруппами на поверхности CdSiO_3 . Данный процесс приводит к образованию радикала $\cdot\text{OH}$, обладающего сильными окислительными свойствами. Электроны зоны проводимости реагируют с акцепторами электронов, адсорбированных на поверхности растворенного в воде кислорода. Образуются радикалы [24]:



Образованные таким образом высокоактивные радикалы O_2^- и $\cdot\text{OH}$ окисляют молекулы МС, которые адсорбируются на поверхности фотокатализатора с образованием различных промежуточных соединений, впоследствии разлагающихся до неорганических продуктов:



4. Заключение

Разработан метод синтеза с использованием МВ излучения для получения метасиликата кадмия (CdSiO_3) из водных растворов. МВ метод представляет собой более быструю и энергоэффективную альтернативу традиционным

методам и позволяет осуществлять контролируемое образование нанодисперсных, высокочистых порошков силикатов. Изменяя температуру обработки и подвергая образцы воздействию протонного облучения, ширина запрещенной зоны полученного CdSiO_3 изменялась в пределах 5.06–5.46 эВ, что подтверждает его потенциал для применения в качестве диэлектрика. Важно отметить, что метасиликат кадмия демонстрирует высокую фотокаталитическую активность под ультрафиолетовым облучением, эффективно разлагая МС — распространенный краситель-загрязнитель. Это свидетельствует о его пригодности в качестве фотокатализатора, применяемого при очистке сточных вод. Синтезированный CdSiO_3 , термообработанный при 100°C, продемонстрировал устойчивость к радиации, сохраняя свои структурные и оптические свойства под воздействием протонного облучения. В целом результаты подтверждают, что МВ метод является эффективным способом получения метасиликата кадмия с желаемыми фотокаталитическими и радиационно-стойкими свойствами, что делает его перспективным материалом для передовых технологических применений.

Исследование поддержано Комитетом по высшему образованию и науке МОНКС РА (научные проекты №21Т-1Д146 и №24LCG-1C025).

ЛИТЕРАТУРА

1. **K.S. Shaaban, W.M. Abd-Allah, Y.B. Saddeek.** Opt. Quantum Electron., **52**, 3 (2020).
2. **S. Bahammam, S. Abd, F.M. Ezz-Eldin.** Results Phys., **7**, 241 (2017).
3. **X. Forestier, J. Cimek, I. Kujawa, R. Kasztelanic, D. Pysz, K. Orliński, R. Stępień, R. Buczyński.** J. Non-Cryst. Solids, **503**, 52 (2019).
4. **X.F. Qu, F.L. Du, L.X. Cao.** Adv. Mater. Res., **873**, 831 (2014).
5. **B.M. Manohara, H. Nagabhushana, K. Thyagarajan, B.D. Prasad, S.C. Prashantha, S.C. Sharma, B.M. Nagabhushana.** Adv. Sci. Lett., **22**, 785 (2016).
6. **Q. Xiaofei, C. Lixin, L. Wei, S. Ge.** J. Alloys Compd., **533**, 83 (2012).
7. **D.V. Sunitha, C. Manjunatha, C.J. Shilpa, H. Nagabhushana, S.C. Sharma, B.M. Nagabhushana, N. Dhananjaya, C. Shivakumara, R.P.S. Chakradhar.** Spectrochim. Acta Part A., **99**, 279 (2012).
8. **K. Soppin, B.M. Manohara.** Bull. Mater. Sci., **44**, 49 (2021).
9. **M. Masjedi-Arania, M. Salavati-Niasari.** Ultrason. Sonochem., **43**, 136 (2018).
10. **H.A. Badran, K.A. AL-Aladil, H.G. Lazim, A.Y. Al-Ahmad.** J. Mater. Sci.: Mater. Electron., **27**, 2212 (2016).
11. **C. Manjunatha, D.V. Sunitha, H. Nagabhushana, B.M. Nagabhushana, S.C. Sharma, R.P.S. Chakradhar.** Spectrochim. Acta Part A, **93**, 140 (2012).
12. **E.T. Thostenson, T.W. Chou.** Compos. Part A, **30**, 1055 (1999).
13. **B.L. Hayes.** Microwave Synthesis: Chemistry at the Speed of Light. CEM Publishing, Matthews NC, 2002.
14. **A.K. Mandal, R. Sen.** Mater. Manuf. Process., **32**, 1 (2017).

15. **P.O. Rismann, T. Ohlsson, B. Wass.** J. Microw. Power Electromagn. Energy, **22**, 193 (1987).
16. **M.A. Janney, C.L. Calhoun, H.D. Kimrey.** J. Am. Ceram. Soc., **75**, 341 (1992).
17. **V.V. Bagramyan, A.A. Sarkisyan, C. Ponzoni, R. Rosa, C. Leonelli.** Theor. Found. Chem. Eng., **49**, 731 (2015).
18. **S. Singh, D. Gupta, V. Jain, A.K. Sharma.** Mater. Manuf. Process., **30**, 1 (2015).
19. **S. Chandrasekaran, S. Ramanathan, T. Basak.** AIChE J., **58**, 330 (2012).
20. **A.A. Sargsyan, R.A. Mnatsakanyan, T.V. Grigoryan, A.A. Kazaryan, A.A. Petrosyan, V.V. Harutyunyan, A.O. Badalyan, N.R. Aghamalyan, V.V. Baghramyan.** J. Contemp. Phys., **58**, 397 (2023).
21. **N.R. Aghamalyan, A.A. Sargsyan, T.S. Azatyan, T.V. Grigoryan, A.A. Kazaryan, A.A. Petrosyan, H.T. Gyulasyan, Ye.A. Kafadaryan, M.N. Nersisyan, N.B. Knyazyan, V.V. Baghramyan.** J. Contemp. Phys., **59**, 199 (2024).
22. **A. Badalyan, V. Harutyunyan, E. Aleksanyan, N. Grigoryan, A. Arestakyan, V. Arzumanyan, A. Manukyan, V. Baghramyan, A. Sargsyan, O. Culicov.** Phys. Part. Nucl. Lett., **20**, 1259 (2023).
23. **K. Soppin, H.R. Venkatesha, B.M. Manohara.** Res. J. Pharm. Technol., **14**, 5330 (2021).
24. **A. Houas, H. Lachheb, M. Ksibi, E. Elaloui, C. Guillard, J-M. Herrmann.** Appl. Catal. B: Environ., **31**, 145 (2001).

PHOTOCATALYTIC AND RADIATION-OPTICAL PROPERTIES OF CADMIUM METASILICATE SYNTHESIZED BY THE MICROWAVE METHOD

A.A. SARGSYAN, T.S. AZATYAN, E.M. ALEKSANYAN, N.B. KNYAZYAN,
T.V. GRIGORYAN, A.A. KAZARYAN, A.A. PETROSYAN, V.V. HARUTYUNYAN,
A.O. BADALYAN, S.S. PIRUMOV, V.V. BAGHRAMYAN

A hydrothermal-microwave method for the synthesis of cadmium metasilicate was developed using water-soluble cadmium compounds and sodium silicate, demonstrating enhanced efficiency compared to conventional thermal techniques. The synthesized product, cadmium metasilicate, is a nanodispersed powder with high photocatalytic activity and radiation resistance. The physicochemical properties of the synthesized cadmium metasilicate were investigated using differential thermal analysis, X-ray diffraction, UV-VIS and IR spectroscopy, as well as electron microscopy. The results showed that the band gap width (E_g) of the obtained powder varies within the range of 5.06–5.46 eV depending on the processing temperature and proton irradiation. The material synthesized by the proposed method can be used as a dielectric, a photocatalyst, and for protection against ionizing radiation.

СТРУКТУРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ МИШЕНЕЙ Zn/Ag/Fe/Cu И ФОРМИРОВАНИЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК ZnO/Ag/Fe/Cu *p*-ТИПА ПРОВОДИМОСТИ DC-МАГНЕТРОННЫМ МЕТОДОМ ПРИ КОМНАТНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

Э.Р. АРАКЕЛОВА^{1*}, С.Л. ГРИГОРЯН¹, А.А. МИРЗОЯН¹, А.Б. МИРЗОЯН¹,
Л.М. САВЧЕНКО¹, А.М. ХАЧАТРЯН^{1,2}, М.С. ЕРАНОСЯН³

¹Национальный политехнический университет Армении, Ереван, Армения

²Институт радиофизики и электроники НАН Армении, Аштарак, Армения

³Институт химической физики имени А.Б. Налбандяна, Ереван, Армения

*e-mail: emma_arakelova@yahoo.com

(Поступила в редакцию 15 октября 2025 г.)

Легированием цинка переходными металлами (Ag+Fe+Cu) сформированы мишени: Zn/Ag/Fe/Cu (Zn95, Ag2, Fe2, Cu 1%; Zn94, Ag2, Fe2, Cu2% и Zn92, Ag2, Fe3, Cu3%). Получены мишени с небольшим изменением параметров решётки Zn. DC-магнетронным распылением Zn/Ag/Fe/Cu мишени с заданным стехиометрическим составом в смеси газов Ar:O₂, в вакууме порядка 0.666 Па сформированы наноразмерные плёнки ZnO/Ag/Fe/Cu с *p*-типом проводимости на стеклянных подложках при комнатной температуре. Структурные, электрофизические, оптические и морфологические характеристики полученных плёнок исследованы методами рентгеновской дифрактометрии (XRD), атомно-силовой микроскопии, UV/VIS спектроскопии и холловских измерений. На дифрактограммах плёнок ZnO/Ag/Fe/Cu выявлены характерные дифракционные пики, соответствующие кристаллографическим плоскостям (002), (101), (100) и (010). Пропускание исследованных плёнок составило около 85–97% в диапазоне длин волн 460–930нм. Концентрация свободных носителей пленок ZnO/Ag/Fe/Cu порядка 10²¹см⁻³. Плёнки ZnO/Ag/Fe/Cu могут быть интегрированы в устройства оптоэлектроники в качестве функциональных элементов.

1. Введение

В современном материаловедении среди широкозонных оксидов оксид цинка является одним из самых перспективных материалов благодаря широкому спектру функциональных свойств. Полупроводниковые пленки и наночастицы ZnO нашли широкое практическое применение в медицине, а также в оптоэлектронных и сенсорных устройствах [1–3]. Наночастицы ZnO проявляют антимикробную [4], антибактериальную [5], противовирусную [6], противогрибковую [7] и противораковую [8] активность. Терапевтический эффект биологически активных соединений, салицилиден аминокислот и лекарственных препаратов значительно усиливается при нанесении наноразмерных частиц ZnO на их поверхность методом DC-магнетронного напыления при комнатной температуре, как показано в работах [9–12].

Тонкие плёнки ZnO, а также плёнки, легированные постпереходными металлами (например, Al, In), переходными металлами (Ag, Fe, Cu, Ti, V) и щёлочноземельными элементами (например, Mg), благодаря своим структурным, оптическим, электрическим [13–20], фотолюминесцентным [21–24] и пьезоэлектрическим свойствам [25, 26], могут быть интегрированы в различные устройства, включая прозрачные электроды для солнечных элементов [27, 28], а также химические [29, 30], газовые [31, 32], биологические сенсоры [33, 34] и пьезоэлектрические преобразователи [35, 36]. Стабильность электрофизических свойств поликристаллических пленок чистого ZnO невысока, поэтому их характеристики могут значительно изменяться со временем или при термических воздействиях.

Легирование ZnO переходными металлами значительно изменяет электронные, оптические и пьезоэлектрические свойства полупроводниковых материалов [37–39] и может способствовать стабилизации его микроструктуры и функциональных характеристик таких как электропроводность, спектральные диапазоны прозрачности, фоточувствительность, люминесценция, и другие [37]. Известно, что материалы с широкой запрещённой зоной, такие как ZnO, трудно поддаются контролируемому легированию из-за наличия структурных дефектов в кристаллической решётке.

Метод оптимизации электронных и оптических свойств ZnO использовался в работе авторов [38] с целью исследования оптимального уменьшения ширины запрещённой зоны. Анализ оптимизации геометрии показал, что системы, легированные Fe, Cr, Mn и Nb, являются наиболее стабильными структурами среди изученных материалов, используемых в фотокаталитических процессах деградации красителей. В обзорной статье авторов [39] рассмотрены достижения в области пьезоэлектрических устройств для сбора энергии и датчиков на основе легированного ZnO, а также изучена роль легирующих добавок в улучшении пьезоэлектрических свойств ZnO с целью разработки высокопроизводительных пьезоэлектрических наногенераторов и датчиков.

Ранее нами была предложена технология легирования цинка путем введения в кристаллическую решётку двух примесей, Ag+Fe [40, 41]. В настоящей работе предлагается структурное конструирование мишени Zn/Ag/Fe/Cu и технология легирования цинка тремя переходными металлами, Ag+Fe+Cu, с целью формирования тонких плёнок ZnO/Ag/Fe/Cu методом DC-магнетронного распыления при комнатной температуре.

Введение трёх акцепторных примесей, Ag+Fe+Cu, в решётку Zn компенсирует разницу в размерах ионов легирующих элементов, что способствует уменьшению напряжений в кристаллической решётке. Это связано с тем, что ионные радиусы примесей отличаются от радиуса катиона Zn²⁺ (0.074 нм): радиус иона Fe³⁺ меньше (0.064 нм), радиусы Fe²⁺ (0.076 нм) и Cu²⁺ (0.080 нм) близки к нему, а радиусы Ag³⁺ (0.089 нм), Cu⁺ (0.098 нм) и Ag²⁺ (0.109 нм) несколько больше.

Технология контролируемого легирования цинка ионами серебра, железа и меди (Ag+Fe+Cu) позволяет получать мишени Zn/Ag/Fe/Cu с небольшим изменением параметров решётки Zn. Методом DC-магнетронного распыления данных мишений в газовой смеси Ar:O₂ получены наноразмерные плёнки ZnO/Ag/Fe/Cu при комнатной температуре подложки с сохранением структуры вюрцита ZnO с

заданными кристаллографическими, оптическими и электрофизическими свойствами.

Целью настоящей работы являлось формирование легированных ($\text{Ag}+\text{Fe}+\text{Cu}$) наноразмерных пленок оксида цинка с *p*-типом проводимости, осаждённых на стеклянные подложки при комнатной температуре, обладающих высокой концентрацией носителей заряда порядка 10^{21}cm^{-3} , что является актуальной задачей для их применения в оптоэлектронике.

2. Экспериментальная часть

2.1. Легирование цинка ионами серебра, железа и меди ($\text{Ag}+\text{Fe}+\text{Cu}$) и формирование мишеней $\text{Zn}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$ для DC-магнетронного распыления

Легирование цинка тремя переходными металлами ($\text{Ag}+\text{Fe}+\text{Cu}$) несколько отличается от технологии легирования цинка $\text{Ag}+\text{Fe}$, описанной нами в работах [40, 41]. При изготовлении трёх мишеней $\text{Zn}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$ (Zn95Ag2Fe2Cu1\% , Zn94Ag2Fe2Cu2\% и Zn92Ag2Fe3Cu3\%) использовались цинковые гранулы, что обусловлено высокой окисляемостью цинка. Гранулы измельчались в планетарной мельнице до фракционного состава 150–200 мкм, после чего смешивались с порошками Ag , Fe и Cu фракционного состава 50–70 мкм и чистотой 99.99% в объёме барабана в течение трёх часов. Ввиду значительной разницы в температурах плавления Zn , Ag , Fe и Cu , (419, 950, 1085 и 1538°C, соответственно) и высокой окисляемости цинка при повышенных температурах, как было показано нами ранее, была применена технология получения сплава заданного состава. Процесс изготовления мишеней $\text{Zn}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$ заключался в следующих операциях: приготовление порошковой композиции из цинка, серебра, железа и меди; тщательное перемешивание смеси в планетарной мельнице в течении трёх часов при комнатной температуре с целью формирования фаз внедрения в системе $\text{Zn}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$; прессование полученной композиции в специальной прессформе (диаметр заготовки мишени 67 и высота 8 мм) при давлении порядка 500 кг/см²; спекание заготовки при температуре 470°C в течение одного часа в муфельной печи; токарная обработка заготовки мишени до окончательных размеров (диаметр 55 и высота 5 мм). Изготовлены мишени для использования в модернизированной установке УВН-71П3, представляющей собой DC-магнетронное устройство.

На рис.1 показаны дифрактограммы порошковых образцов, полученных из цинковых мишеней (1) и мишеней, легированных $\text{Ag}+\text{Fe}$ (2,3,4) и $\text{Ag}+\text{Fe}+\text{Cu}$ (5,6,7).

Рентгенофазовые исследования порошковых образцов из цинковых мишеней (1), легированных $\text{Ag}+\text{Fe}$ (2,3,4), и $\text{Ag}+\text{Fe}+\text{Cu}$ (5,6,7), проведены на рентгеноовском дифрактометре EMPYREAN (Panalytical Company) с использованием излучения $\text{CuK}\alpha$ и гониометра высокого разрешения. Сбор данных и идентификация фаз выполнены с использованием программного обеспечения X'Pert High Score Plus, которое обеспечивает автоматизированный фазовый анализ, включая измерение, обработку и интерпретацию дифрактограмм. Идентификация фаз осуществлялась с помощью базы экспериментальных данных PDF-2 (ICDD). На дифрактограммах цинковых мишеней, легированных ($\text{Ag}+\text{Fe}$) и ($\text{Ag}+\text{Fe}+\text{Cu}$), наблюдается небольшой сдвиг рефлексов межплоскостных расстояний. В табл.1

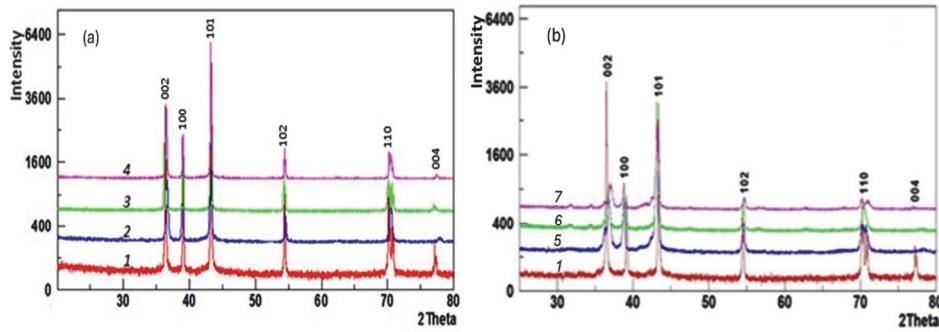


Рис.1. (а) Дифрактограммы цинковой (Zn) и Zn/Ag/Fe мишней: (1) Zn; (2) Zn96, Ag2, Fe2%; (3) Zn94, Ag2, Fe4% и (4) Zn92, Ag2, Fe8%. (б) Дифрактограммы цинковой (Zn) и Zn/Ag/Fe/Cu мишней: (1) Zn; (5) Zn95, Ag2, Fe2, Cu1%; (6) Zn94Ag2, Fe2, Cu2% и (7) Zn92 Ag2, Fe3, Cu3%.

и 2 представлены межплоскостные расстояния, параметры и объём элементарной ячейки Zn (1), Zn/Ag/Fe (2–4) и Zn (1), Zn/Ag/Fe/Cu (5–7) мишней

$$d = 1/\left(\frac{4}{3} \times \frac{(h^2 + hk + k^2)}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}\right)^{1/2}, \quad V = \frac{\sqrt{3}}{2} \times a^2 c.$$

Табл.1. Межплоскостные расстояния d (Å), параметры решётки a и c (Å) и объём элементарной ячейки V (Å³) для мишней состава: 1) Zn; 2) Zn96, Ag2, Fe2%; 3) Zn94, Ag2, Fe4% и 4) Zn92, Ag2, Fe8%

Мишень	Межплоскостные расстояния d , Å						Параметры решётки, Å Zn, Zn/Ag/Fe		Объём решётки, Å ³ Zn, Zn/Ag/Fe
	d_{002}	d_{100}	d_{101}	d_{102}	d_{110}	d_{004}	a	c	
1	2.4688	2.3048	2.0889	1.6856	1.3316	1.2359	2.6614	4.9377	30.287
2	2.4551	2.3168	2.0924	1.6835	1.3357	1.2271	2.6753	4.9102	30.434
3	2.4729	2.3076	2.0916	1.6876	1.3326	1.2367	2.6646	4.9458	30.408
4	2.4639	2.3090	2.0910	1.6853	1.3336	1.2330	2.6652	4.9279	30.313

Табл.2. Межплоскостные расстояния d (Å), параметры решётки a и c (Å) и объём элементарной ячейки V (Å³) для мишней состава: 1) Zn; 5) Zn95Ag2Fe2Cu1(%); 6) Zn94Ag2Fe2Cu2(%); 7) Zn92Ag2Fe3Cu3(%)

Мишень	Межплоскостные расстояния d , Å						Параметры решётки, Å Zn, Zn/Ag/Fe/Cu		Объём решётки, Å ³ Zn, Zn/Ag/Fe/Cu
	d_{002}	d_{100}	d_{101}	d_{102}	d_{110}	d_{004}	a	c	
1	2.4688	2.3048	2.0889	1.6856	1.3316	1.2359	2.6614	4.9377	30.287
2	2.4433	2.3226	2.0968	1.6827	1.3301	1.2195	2.6820	4.8866	30.440
3	2.4392	2.3189	2.0968	1.6830	1.3399	1.2285	2.6771	4.8784	30.272
4	2.4558	2.3216	2.0958	1.6794	1.3376	1.2229	2.6808	4.9116	30.558

2.2. DC-магнетронное формирование $ZnO/Ag/Fe/Cu$ плёнок на стеклянных подложках

Метод магнетронного распыления, по сравнению с другими тонкопленочными технологиями, имеет ряд преимуществ: относительно низкой температурой подложки, высокой адгезией пленки к подложке, приемлемой скоростью роста и хорошей однородностью пленки. Для электропроводящей мишени возможна работа в режиме DC-магнетронного распыления на постоянном токе (direct current, DC). Основное преимущество метода DC-магнетронного распыления заключается в его широком применении в электронной промышленности для нанесения функциональных покрытий. Ранее нами с использованием DC-магнетронного распыления цинковой мишени в температурном диапазоне $-30^{\circ}C \leq T \leq 30^{\circ}C$ [42] были получены полупроводниковые пленки ZnO на подложках из стекла, кремния, а также на подложках из поли-3,4-этилендиокситиофена, легированного полистиролсульфонатом (PEDOT-PSS) и PEDOT-PSS в полимерной матрице PVA. Наноразмерные плёнки $ZnO/Ag/Fe/Cu$ на стеклянных подложках при комнатной температуре были получены DC-магнетронным распылением мишени $Zn/Ag/Fe/Cu$ следующего состава: 1) $Zn/Ag2/Fe2/Cu1\%$; 2) $Zn/Ag2/Fe2/Cu2\%$; и 3) $Zn/Ag2/Fe3/Cu3\%$ в аргон-кислородной среде при парциальном давлении $80 \text{ см}^3/\text{мин}$ для Ar и $17.5 \text{ см}^3/\text{мин}$ для O_2 на модернизированной установке УВН-71П3 при рабочем вакууме 0.666 Па. Установка представляет собой DC-магнетронное устройство для ионно-плазменного распыления металлической мишени, оснащённое системой измерения и контроля рабочего газа, блоком питания и индикации, а также двумя регуляторами расхода газов Ar и O_2 , которые обеспечивают точное измерение и контроль (с точностью $\pm 1\%$) содержания газов и уровня вакуума в камере в процессе формирования пленки. Перед осаждением наноразмерных плёнок $ZnO/Ag/Fe/Cu$ подложки очищались ацетоном и этанолом, промывались дистиллированной водой и высушивались потоком азота N_2 чистотой 99.99%. Вакуумная камера распыления была предварительно дегазирована в течении 10 минут до 2.66×10^{-4} Па для обеспечения чистоты процесса напыления. Система на основе элемента Пельтье была использована для проведения экспериментов при комнатной температуре, которая обеспечивала снижение и стабилизацию температуры подложки с высокой точностью. Тонкие пленки $ZnO/Ag/Fe/Cu$ определённой толщины были нанесены на подложки методом DC-магнетронного распыления мишени $Zn/Ag/Fe/Cu$ в газовой смеси $Ar:O_2 = 3:1$ при мощности 200 Вт, рабочем токе 500 мА, вакууме 0.666 Па и расстоянии между мишенью и подложкой 12 см. Измерение и контроль толщины пленки $ZnO/Ag/Fe/Cu$ осуществлялись системой автоматического управления «Микрон-7» и спектрофотометром TF-C-UVIS-SR с точностью $\pm 0.1 \text{ нм}$.

2.3. Структурные, электрофизические, оптические и морфологические характеристики наноразмерных плёнок $ZnO/Ag/Fe/Cu$

Рентгеновские дифрактограммы (XRD) были получены на дифрактометре Empyrean (PANalytical) с использованием CuК α -излучения. Спектры пропускания регистрировались с помощью спектрофотометра TF-C-UVIS-SR,

(Stellar Net. Inc.) в диапазоне длин волн 220–1100 нм. Электрофизические измерения проводились на установке Ecopia HMS-5000 (South Korea). Морфологические характеристики плёнок изучались методом атомно-силовой микроскопии (ACM) с использованием системы HORIBA AFM-Raman LabRAM Nano system.

3. Результаты эксперимента и их обсуждение

Получены тонкие плёнки ZnO/Ag/Fe/Cu при ранее установленных оптимальных технологических параметрах DC-магнетронного распыления мишени Zn/Ag/Fe/Cu: мощность магнетронного источника 200 Вт, соотношение рабочих газов Ar:O₂ = 3:1, [41]. Дифрактограммы образцов плёнок приведены на рис.2. Наноразмерные плёнки ZnO/Ag/Fe/Cu сформированы DC-магнетронным распылением трёх мишеней следующих составов: Zn95, Ag2, Fe2, Cu1% (a); Zn94, Ag2, Fe2, Cu2% (b) и Zn92, Ag2, Fe3, Cu3% (c) с толщинами плёнок: (кривые 1–4): 90, 130, 180 и 250 нм (1); 80, 135, 190 и 300 нм (2); 150, 180, 250 и 330 нм (3); 80, 114, 340 и 490 нм (4). Легирование вносит внутренние напряжения в кристаллическую решётку, вызывая небольшие смещения рефлексов, межплоскостных расстояний, параметров и объёма элементарных ячеек в структурах мишеней Zn/Ag/Fe и Zn/Ag/Fe/Cu (табл.1 и табл.2).

Для плёнок ZnO/Ag/Fe/Cu (рис.2), полученных DC-магнетронным распылением первой (рис.2a) мишени, на дифрактограмме при всех толщинах плёнок наблюдаются характерные рефлексы, соответствующие межплоскостным расстояниям (002) и (101). Для второй (рис.2b) мишени при увеличении содержания Cu до 2% наблюдаются рефлексы 100 и 101, что

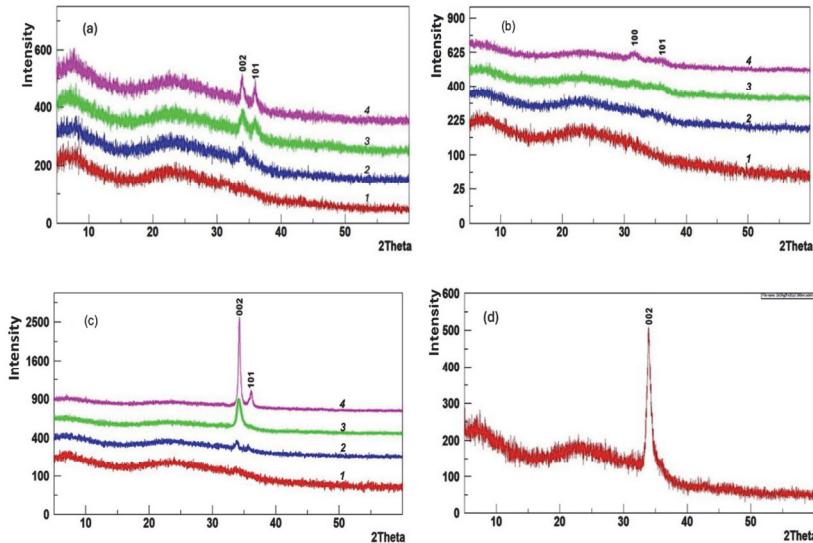


Рис.2. Дифрактограммы образцов плёнок ZnO/Ag/Fe/Cu для трёх мишеней (a, b, c) следующего состава и толщин (1–4) плёнок: (a) Zn95Ag2Fe2/Cu1%: (1) 90; (2) 130; (3) 180; и (4) 250 нм; (b) Zn94, Ag2, Fe2, Cu2%: (1) 150; (2) 180; (3) 250; и (4) 330 нм; (c) Zn92, Ag2, Fe3, Cu3%: (1) 80; (2) 114; (3) 340 и (4) 490 нм; (d) дифрактограмма образца плёнки ZnO/Ag/Fe/Cu (состав мишени: Zn92, Ag2, Fe3, Cu3%) толщиной 340 нм.

объясняется незначительным сужением решётки из-за меньшего ионного радиуса меди (табл.2). При магнетронном распылении третьей (рис.2с) мишени наблюдаются характерные рефлексы вдоль кристаллографических направлений 002 и 101, как на дифрактограммах плёнок, полученных при распылении первой мишени. На этой дифрактограмме (рис.2с) заметна выраженная текстура вдоль направления 002. На дифрактограмме образца плёнки ZnO/Ag/Fe/Cu толщиной 340 нм (рис.2д) эта текстура хорошо выражена. Нецентросимметричность, пьезо- и пироэлектрические свойства ZnO и ZnO/Ag/Fe/Cu в форме вюрцита, высокая энергия связи экситона и регулируемая ширина запрещённой зоны оксида цинка имеют решающее значение в его применении в оптоэлектронике. Структура вюрцита относится к гексагональной кристаллической системе (пространственная группа Р63mc) и состоит из чередующихся плоскостей тетраэдрически координированных ионов Zn и O, расположенных вдоль оси *c*, что определяет его широкое применение в различных оптоэлектронных устройствах.

Омические контакты к плёнкам ZnO/Ag/Fe/Cu для электрических измерений были сформированы методом импульсного лазерного напыления с использованием золота (Au) и серебра (Ag). Осаждение Au и Ag было проведено на вакуумной установке ВУП-4 с предельным остаточным давлением 2×10^{-6} мм рт. ст. Исследования проведены с использованием импульсного лазера с длиной волны излучения 1.064 мкм, длительностью импульса $\sim 3 \times 10^{-8}$ сек, интенсивностью в зоне облучения мишени от 10^8 до 10^9 Вт/см².

Золото было выбрано для создания омического контакта с пленкой ZnO/Ag/Fe/Cu *p*-типа проводимости. Контактное сопротивление ρ_c (*p*-ZnO/Ag/Fe/Cu) составляет 2.5×10^{-4} Ом см².

В табл.3 и 4 приведены электрофизические характеристики ZnO/Ag/Fe/Cu плёнок, представлена зависимость электрофизических параметров плёнок от их толщины, процентного содержания Fe и Cu в решётке Zn, а также концентрации свободных носителей для образцов с *p*-типов проводимости. Уменьшение объёмной концентрации носителей заряда *n*-типа в ZnO (от 1.53×10^{12} до $4.04 \times$

Табл.3. Электрофизические характеристики ZnO и ZnO/Ag/Fe/Cu плёнок *p*-типа проводимости на стеклянных подложках для мишеней с составами: (1) Zn и (2) Zn95/Ag2/Fe2/Cu1%

Толщина плёнок, нм		Тип проводимости		Объёмная концентрация носителей, см ⁻³		Удельное сопротивление, Ом·см		Подвижность, см ² /В·с	
		ZnO	ZnO/Ag/Fe/Cu	ZnO	ZnO/Ag/Fe/Cu	ZnO	ZnO/Ag/Fe/Cu	ZnO	ZnO/Ag/Fe/Cu
Мишени									
1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
90	80	<i>n</i>	<i>p</i>	1.05×10^{12}	8.53×10^{11}	6.84×10^5	8.64×10^5	230.21	56.1
130	135	<i>n</i>	<i>p</i>	8.31×10^{11}	7.45×10^{11}	3.04×10^5	1.50×10^6	247.31	57.0
180	190	<i>n</i>	<i>p</i>	6.11×10^{11}	2.53×10^{11}	5.58×10^4	1.58×10^6	277.17	75.2
250	300	<i>n</i>	<i>p</i>	4.04×10^{11}	1.05×10^{11}	5.37×10^4	7.87×10^5	287.11	71.3

Табл.4. Электрофизические характеристики ZnO/Ag/Fe/Cu плёнок *p*-типа проводимости на стеклянных подложках для мишеней с составами: 3) Zn94/Ag2/Fe2%Cu2% и 4) Zn92/Ag2/Fe3/Cu3%

Толщина плёнок, нм		Тип проводимости		Объёмная концентрация носителей, см^{-3}		Удельное сопротивление, Ом см		Подвижность, $\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$					
		ZnO/Ag/Fe/Cu											
Мишени													
3	4	3	4	3	4	3	4	3	4				
150	80	<i>p</i>	<i>p</i>	2.56×10^{11}	8.74×10^{15}	1.67×10^5	254	38.67	17.1				
180	114	<i>p</i>	<i>p</i>	2.27×10^{12}	5.21×10^{21}	1.59×10^5	64	47.30	3.7				
250	340	<i>p</i>	<i>p</i>	6.60×10^{12}	7.41×10^{21}	1.04×10^4	63	91.20	4.7				
330	490	<i>p</i>	<i>p</i>	1.47×10^{13}	4.71×10^{18}	1.95×10^4	118	92.10	5.7				

10^{11} см^{-3}) и *p*-типа в ZnO/Ag/Fe/Cu (мишень №2, от 8.53×10^{11} до 1.05×10^{11} , табл.3) при концентрации примесей 2% Ag, 2% Fe и 1% Cu в цинке наблюдалось с увеличением толщины плёнки от 90 до 250 нм для ZnO и от 80 до 300 нм для ZnO/Ag/Fe/Cu (табл.3).

Увеличение толщины плёнки ZnO при комнатной температуре приводит к снижению объёмной концентрации носителей заряда *n*-типа, поскольку совокупное воздействие повышенной плотности дефектов, а также рассеяния на границах зёрен и поверхностях препятствует эффективному транспорту носителей заряда. Это в конечном итоге приводит к повышению удельного сопротивления. В плёнках ZnO/Ag/Fe/Cu (мишень №2), по-видимому, происходит встраивание примесных атомов Cu путём замещения атомов цинка медью или же за счёт внедрения Cu в междоузельные пространства кристаллической решётки цинка.

В плёнках ZnO/Ag/Fe/Cu с увеличением концентрации Cu от 1 до 2 % (мишень №3) усиливается эффект встраивания примесных атомов в кристаллическую решётку ZnO как за счёт замещения цинка медью, так и за счёт внедрения Cu в междоузельные позиции. При этом с ростом толщины плёнок концентрация собственных дефектов ZnO внутри зёрен и на поверхности, вероятно, уменьшается.

Для DC-магнетронного распыления мишени №3 (табл.4) были предусмотрены толщины плёнок в интервале 150–330 нм исходя из результатов по концентрации носителей, полученных при DC-магнетронном распылении мишени №2 для толщин 80–300 нм (см. табл.3). В интервале толщин 150–330 нм при распылении мишени №3 наблюдалось увеличение концентрации носителей от 2.56×10^{11} до $1.47 \times 10^{13} \text{ см}^{-3}$.

При создании мишени №4 (Zn92, Ag2, Fe3, Cu3%) было учтено несколько требований (см табл.4): сохранить структуру вюрцита ZnO, увеличить концентрацию носителей *p*-типа проводимости на два–три порядка (10^{20} – 10^{21} см^{-3}) по сравнению с концентрацией носителей в плёнках ZnO/Ag/Fe (10^{18} см^{-3}) [41], наличие глубоких *p*-акцепторных уровней Cu в плёнках

$\text{ZnO}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$, выбрать диапазон толщин 80–490 нм с целью увеличения концентрации носителей *p*-типа на два–три порядка относительно плёнок $\text{ZnO}/\text{Ag}/\text{Fe}$ с сохранением структуры вюрцита. Достижение проводимости *p*-типа в ZnO посредством легирования цинка ионами $\text{Ag}+\text{Fe}+\text{Cu}$ представляет собой актуальную и интересную задачу.

Совместное легирование цинка $\text{Ag}+\text{Fe}+\text{Cu}$ позволяет преодолеть проблему низкой растворимости. При DC-магнетронном распылении мишени $\text{Zn}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$ такое легирование может приводить к синергетическому эффекту. В этом случае комбинированное влияние на концентрацию носителей оказывается более значительным, чем сумма их индивидуальных воздействий, поскольку влияние собственных дефектов в ZnO приводит к более высокой эффективной концентрации акцепторов.

Каждый легирующий элемент вносит свой вклад в этот эффект: Ag действует как мелкий акцептор, Fe может замещать Zn без изменения структуры, а легирование Cu может модифицировать кристаллическую решетку. При DC-магнетронном распылении мишени №4, $\text{Zn92}/\text{Ag2}/\text{Fe3}/\text{Cu3}\%$ для увеличения концентрации носителей *p*-типа проводимости, выбор интервала толщин пленки в диапазоне 80–490 нм имел решающее значение. В тонких пленках (менее 100 нм) преобладает рассеяние носителей на границах зёрен, что приводит к снижению их подвижности и эффективной концентрации ($\sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$).

В более толстых пленках этого же состава (например, от 114 до 340 нм) влияние поверхностного рассеяния значительно уменьшается. Оптимизация толщины в этом диапазоне позволила значительно увеличить концентрацию носителей плёнок *p*-типа проводимости $\text{Zn92}/\text{Ag2}/\text{Fe3}/\text{Cu3}\%$, которая составила от 5.21×10^{21} до $7.41 \times 10^{21} \text{ см}^{-3}$ (табл.4). Ранее в работе [41] нами было показано, что прозрачность плёнок ZnO , полученных на стеклянных подложках составляет 85–95% в диапазоне длин волн 400–930 нм. Пропускание плёнок $\text{ZnO}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$ на стеклянных подложках при комнатной температуре для составов мишеней: №2 ($\text{Zn95}, \text{Ag2}, \text{Fe2}, \text{Cu1}\%$), №3 ($\text{Zn94}, \text{Ag2}, \text{Fe2}, \text{Cu2}\%$) и №4 ($\text{Zn92}, \text{Ag2}, \text{Fe3}, \text{Cu3}\%$) в диапазоне длин волн 460–930 нм показало, что степень прозрачности составляет 85–97% (рис.3). Исследована ширина запрещённой зоны плёнок ZnO и $\text{ZnO}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$ методом измерения их коэффициентов пропускания и отражения (рис.3) и определения положения фундаментальной полосы поглощения.

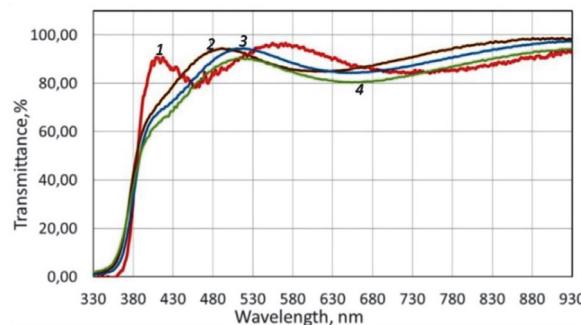


Рис.3. Спектры пропускания плёнок ZnO (1) и $\text{ZnO}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$ (кривые 2, 3 и 4), осаждённых из мишеней: 2 ($\text{Zn 95}, \text{Ag2}, \text{Fe2}, \text{Cu1}\%$), 3 ($\text{Zn 94}, \text{Ag2}, \text{Fe2}, \text{Cu2}\%$) и 4 ($\text{Zn 92}, \text{Ag2}, \text{Fe3}, \text{Cu3}\%$). Толщина плёнок составляет 300 нм.

Табл.5. Ширина запрещённой зоны наноразмерных плёнок ZnO и ZnO/Ag/Fe/Cu, для мишеней состава: Zn(1), Zn95, Ag2, Fe2, Cu1% (2), Zn94, Ag2, Fe2, Cu2% (3) и Zn92, Ag2, Fe3, Cu3% (4)

Толщина плёнок, нм				Ширина запрещённой зоны, эВ			
Мишени				Мишени			
1	2	3	4	1	2	3	4
ZnO	ZnO/Ag/Fe/Cu				Zn O	ZnO/Ag/Fe/Cu	
90	80	150	80	3.45	3.71	3.56	3.76
130	135	180	114	3.40	3.48	3.54	3.51
180	190	250	340	3.37	3.43	3.46	3.44
250	300	330	490	3.35	3.41	3.44	3.43

Значение ширины запрещённой зоны плёнок ZnO согласуется с теоретическими значениями для объемного ZnO (табл.5). Экспериментальные значения ZnO/Ag/Fe/Cu 3.71–3.76 эВ достаточно близки и согласуются с данными авторов [21].

Исследования, выполненные методом ACM, с использованием системы HORIBA AFM-Raman LabRAM Nano (программное обеспечение LabSpec 6), позволили провести комплексный анализ морфологии тонких наноразмерных пленок ZnO/Ag/Fe/Cu толщиной 80 и 490 нм. Зависимость характеристик поверхности от толщины пленки (рис.4а, б) свидетельствует о закономерном процессе роста. Для тонких пленок ZnO/Ag/Fe/Cu (80 нм) наблюдалась зернистая структура. Обработка данных и гистограммы распределения частиц по размерам выявили размеры кристаллитов ~ 90 нм. Поверхность характеризовалась наличием локальных углублений и относительно высокой шероховатостью (среднеквадратичное отклонение $RMS \approx 5.6$ нм; средняя шероховатость $Ra \approx 7.2$ нм). Такая морфология типична для стадии роста, где зарождение кристаллитов сопровождается образованием многочисленных границ зерен. Эти

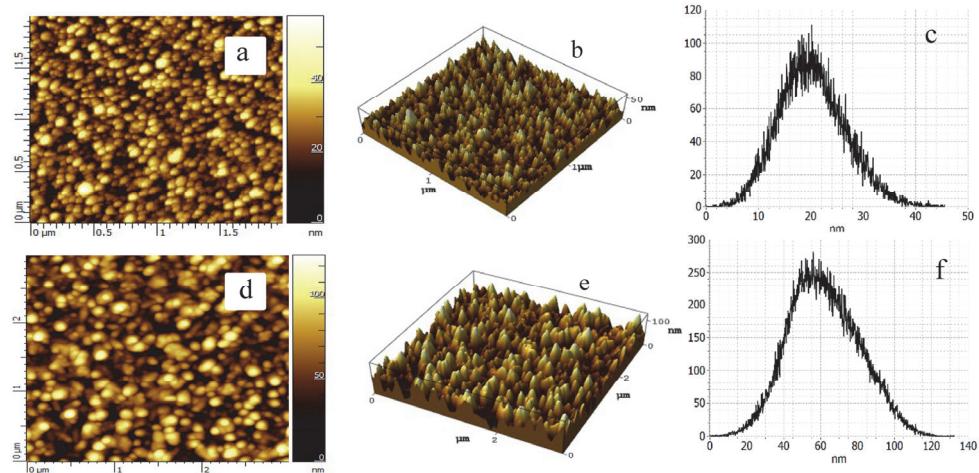


Рис.4. 2D, 3D ACM-микрофотографии поверхности наноразмерных пленок и гистограммы ZnO/Ag/Fe/Cu *p*-типа проводимости толщиной 80 нм (а, б, с) и 490 нм (д, е, ф).

границы действуют как дефектные области, создавая потенциальные барьеры для транспорта носителей заряда. Значительные изменения наблюдались для пленок толщиной 490 нм (рис.4д, е). На их поверхности наблюдался значительный рост зерен, достигающих размеров ~ 200 нм, а максимальная высота структур увеличилась до ~ 54 нм. В то же время шероховатость поверхности была резко снижена ($RMS \approx 1.7$ нм; $Ra \approx 2.6$ нм), что свидетельствует о формировании гладкого и практически непрерывного рельефа. Такая морфология характерна, когда зерна объединяются, а плотность межзеренных границ значительно уменьшается. В результате улучшаются условия переноса заряда: при уменьшении количества границ барьерные эффекты минимизируются, а длина свободного пробега носителей заряда увеличивается [43]. Улучшение морфологических параметров связано с функциональными свойствами пленок. Сглаживание поверхности минимизирует диффузное рассеяние света, сохраняя высокую прозрачность в диапазоне 85–97%. Одновременно крупнозернистая структура и уменьшение количества межзеренных границ повышают электропроводность. Важно отметить, что исследованные пленки демонстрируют высокую концентрацию дырок (10^{18} см^{-3}), что делает их конкурентоспособными по сравнению с традиционными прозрачными проводящими оксидами. Высокая концентрация носителей заряда в сочетании с однородной морфологией обеспечивает оптимальный баланс между электропроводностью и оптической прозрачностью, что является ключевым требованием для практического применения в оптоэлектронике [44]. Пленки толщиной 490 нм продемонстрировали благоприятные свойства, сочетая крупнозернистую структуру, низкую шероховатость и высокую концентрацию носителей заряда. Эти особенности делают их перспективными для использования в качестве прозрачных электродов в оптоэлектронных устройствах, где требуются материалы как с хорошей проводимостью, так и с высокой прозрачностью.

4. Заключение

Сформированы мишени $\text{Zn}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$ введением трёх акцепторных примесей $\text{Ag}+\text{Fe}+\text{Cu}$ в решётку Zn . Методом DC-магнетронного распыления $\text{Zn}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$ мишней при комнатной температуре получены наноразмерные пленки $\text{ZnO}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$. Варьированием толщин пленок $\text{ZnO}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$ при ранее разработанных технологических параметрах определены оптимальные толщины тонких пленок $\text{ZnO}/\text{Ag}/\text{Fe}$ в интервале 80–490 нм, при которых формируются ориентированные, кристаллические, стехиометрические пленки на стеклянных подложках. Введением легирующих примесей в решётку цинка с учётом эффекта компенсации разницы в размерах ионов легирующих элементов и ионов цинка достигнута возможность внесения допиравющей примеси в решётку Zn . Сформирована структура вюрцита в ZnO , которая сохраняется в легированной пленке $\text{ZnO}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$. Определено влияние легирующих примесей ($\text{Ag}+\text{Fe}+\text{Cu}$) на электрофизические и оптические свойства пленок $\text{ZnO}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$ на стеклянной подложке.

Получены тонкие пленки $\text{ZnO}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$ *p*-типа проводимости при комнатной температуре подложки, с концентрацией свободных носителей порядка 10^{21} см^{-3} . Прозрачность порядка 85–97%, концентрация свободных

носителей *p*-типа проводимости увеличена от 10^{18} до 10^{21} см⁻³, по сравнению с введением нами ранее двух акцепторных примесей Ag +Fe в решётку цинка.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов № 10-4/1-8 и № 22AA-2J029 Государственного комитета по науке.

ЛИТЕРАТУРА

1. **M. Carofiglio, S. Barui, V. Cauda, M. Laurenti.** Appl. Sci., **10**, 5194 (2020).
2. **D. Buckley, A. Lonergan, C. O'Dwyer.** ECS J. Solid State Sci. Technol., **14**, 20 (2025).
3. **S. Vyas.** J. Matthey Technol. Rev., **64**, 202 (2020).
4. **N. Padmavathy, R. Vijayaraghavan.** Sci. Technol. Adv. Mater., **9**, 35 (2008).
5. **L. Zhang, Y. Jiang, Y. Ding, M. Povey, D. York.** J. Nanoparticle Res., **9**, 479 (2007).
6. **J. Gupta, M. Irfan, N. Ramgir, K.P. Muthe, A.K. Debnath, S. Ansari, J. Gandhi, C.T. Ranjith-Kumar, M. Surjit.** Front // Microbiol, **13**, 881595 (2022).
7. **H.S. Elshafie, A. Osman, M.M. El-Saber, I. Camele, E. Abbas.** Plant Pathol. J., **39**, 265, (2023).
8. **G. Bisht, S. Rayamajhi.** Nanobiomedicine (Rij), **3**, 9 (2016).
9. **E. Arakelova, A. Khachatryan, K. Avjyan, Z. Farmazyan, A. Mirzoyan, L. Savchenko, S. Ghazaryan, F. Arsenyan.** Nat. Sci., **2**, 1341 (2010).
10. **E.R. Arakelova, S.G. Grigoryan, A.M. Khachatryan, A.A. Mirzoian, Z.M. Farmazyan, S.L. Grigoryan, M.A. Yeranosyan, F.G. Arsenyan, R.E. Muradyan, H.V. Gasparyan.** Nat. Sci., **11**, 61 (2019).
11. **E.R. Arakelova, A.M. Khachatryan, A.A. Mirzoian, S.L. Grigoryan, R.E. Muradyan, H.R. Stepanyan, S.G. Grigoryan, M.A. Yeranosyan.** Appl. Phys. A, **130**, 152 (2024).
12. **E.R. Arakelova, S.G. Grigoryan, A.M. Khachatryan, K.E. Avjyan, L.M. Savchenko, F.G. Arsenyan.** Int. J. Med. Sci. Eng., **7**, 1075 (2013).
13. **E. Nowak, M. Szybowicz, A. Stachowiak, W. Koczorowski, D. Schulz, K. Paprocki, K. Fabisiak, S. Los.** Appl. Phys. A, **126**, 552 (2020).
14. **K.D.A. Kumar, S. Valanarasu, S.R. Rosario, V. Ganesh, M. Shkir, C.J. Sreelatha, S. AlFaify.** Solid State Sci., **78**, 58 (2018).
15. **G. Saxena, I.A. Salmani, M.S. Khan.** Nano-Structures & Nano-Objects, **35**, 100986 (2023).
16. **B. Sahoo, D. Behera, S.K. Pradhan, D.K. Mishra, S.K. Sahoo, R.R. Nayak, K.P.C. Sekha.** Mater. Res. Express, **6**, 1150a6 (2019).
17. **Shreepooja Bhat, P. Asha Hind, A. Ayana, B.V. Rajendra.** Physica B: Condensed Matter, **715**, 417617 (2025).
18. **F. Amani, H. Bidadi, M. A. Mohammadi.** Optical Materials, **156**, 115965, (2024).
19. **B. Boiko, M. Yermakov, R. Pshenichnyi, O. Klymov, A. Opanasyuk, O. Dobrozhany, O. Diachenko, Vicente Muñoz-Sanjosé.** Physica B: Condensed Matter, **705**, 417086 (2025).
20. **F. Bouaraba, M.S. Belkaid, S. Lamri.** J. Nano-Electron. Physics, **10**, 04001 (2018).
21. **Y. Zhang, J. Li, K. Lin.** J. Appl. Phys., **138**, 065101 (2025).
22. **K.M. Sandeep, S. Bhat, S.M. Dharmaprkash.** J. Phys. Chem. Solids, **104**, 36 (2017).
23. **N. Narayanan, N.K. Deepak.** Optik, **158**, 1313 (2018).
24. **D. Das, P. Mondal.** RSC Adv., **4**, 35735 (2014).
25. **J. Costa, T. Peixoto, A. Ferreira, F. Vaz, M.A. Lopes.** J. Biomed. Mater. Res. A., **107**, 2150 (2019).
26. **M. Laurenti, M. Castellino, D. Perrone, A. Asvarov, A. Chiolerio, G. Canavese.** Sci. Rep., **7**, 41957 (2017).
27. **K. Portillo-Cortez, S.R. Islas, A. Serrano-Lázaro, A. Ortiz, M.F. García-Sánchez, J.C. Alonso, A. Martínez, C. Ramos, A. Dutt, G. A. Santana.** Appl. Surf. Sci. Adv., **9**,

- 100255 (2022).
28. **B. Sarma, B.K. Sarma.** J. Alloys Compd., **734**, 210 (2018).
 29. **E. Indrajith Naik, T.S. Sunil K. Naik, E. Pradeepa, S. Singh, H.S.B. Naik.** Mater. Chem. Phys., **281**, 125860 (2022).
 30. **R. Sha, A. Basak, P.C. Maity, S. Badhulika.** Sens. Actuators Repo., **4**, 100098 (2022).
 31. **Z.M. Qin, Z.J. Xu, X.Z. Sun.** Surfaces and Interfaces, **65**, 106539 (2025).
 32. **Y. Kang, F. Yu, L. Zhang, W. Wang, L. Chen, Y. Li.** Sol. State Ionics, **360**, 115544 (2021).
 33. **M. Maafa.** Biosensors, **15**, 61 (2025).
 34. **M. Bhakyalatha, S. Sathish, K.C. Sekhar, J.P.B. Silva, K. Kamakshi.** Microchemical J., **213**, 113893 (2025).
 35. **S. Jiang, X. Zhao, J. Zhang, B. Fang, H. Chen, L. Ma, Z. Ding, J. Wei, N. Hao.** Sensors and Actuators: A. Physical, **371**, 115337 (2024).
 36. **N. Bhadwal, R.B. Mrad, K. Behdinan.** Sensors, **8**, 3859 (2023).
 37. **M. Khan, G.A. Nowsherwan, R. Ali, M. Ahmed, N. Anwar, S. Riaz, A. Farooq, S.S. Hussain, S. Naseem and J.R. Choi.** Molecules, **28**, 7963 (2023).
 38. **M.A. Moiz, A. Mumtaz, M. Salman, S.W. Husain, A.H. Baluch, M. Ramzan.** Chem. Phys. Lett., **781**, 138979 (2021).
 39. **C. Jin, J. Zhou, Z. Wu, and J.X.J. Zhang.** Adv. Energy Sustainability Res., **222**, 2500017 (2025).
 40. **E.R. Arakelova, A.A. Mirzoyan, S.L., Grigoryan, A.B. Mirzoyan, A.M. Khachatryan, R.E. Muradyan, V.B. Goginyan, N.R. Mangasaryan.** Proceedings Metallurgy, Materiall.Science, Mining Engeneering, **1**, 53 (2022).
 41. **E.R. Arakelova, S.L. Grigoryan, S.G. Aghbalyan, A.B. Mirzoyan, L.M. Savchenko, A.M. Khachatryan, A.S. Tsokolakyan.** J. Contemporary Physics, **59**, 315 (2025).
 42. **E.R. Arakelova, A.M. Khachatryan, K.E. Avjyan, N.S. Aramyan, V.A. Gevorkyan, S.G. Grigoryan, G.N. Mirzoyan.** J. Contemporary Physics, **46**, 293 (2011).
 43. **T. Minami.** Semicond. Sci. Technol., **20**, 35 (2005).
 44. **K. Elmer.** Semicond. Nature Photonics, **6**, 809 (2012).

STRUCTURAL DESIGN OF Zn/Ag/Fe/Cu TARGETS AND FORMATION OF ZnO/Ag/Fe/Cu THIN FILMS OF *p*-TYPE CONDUCTIVITY BY THE DC- MAGNETRON METHOD AT ROOM TEMPERATURE

E.R. ARAKELOVA, S.L. GRIGORYAN, A.A. MIRZOIAN, A.B. MIRZOIAN,
L.M. SAVCHENKO, A.M. KHACHATRYAN, M.S. YERANOSYAN

By doping zinc with transition metals (Ag+Fe+Cu), the following targets were formed: Zn/Ag/Fe/Cu (Zn95, Ag2, Fe2, Cu 1%; Zn94, Ag2, Fe2, Cu2% and Zn92, Ag2, Fe3, Cu3%). Targets with insignificant changes in the Zn lattice parameters were obtained. Nanosized ZnO/Ag/Fe/Cu films with *p*-type conductivity on glass substrates at room temperature were formed by DC- magnetron sputtering of Zn/Ag/Fe/Cu targets with a given stoichiometric composition in an Ar: O₂ gas mixture in a vacuum of about 0.666 Pa. The structural, electrical, optical, and morphological characteristics of the obtained films were studied using X-ray diffractometry (XRD), atomic force microscopy, UV/VIS spectroscopy, and Hall measurements. The diffraction patterns of the ZnO/Ag/Fe/Cu films revealed characteristic reflexes of interplanar spacings along the 002 and 101, as well as 100 and 010 crystallographic directions. The transmittance of the studied films was approximately 85–97% in the wavelength range of 460–930 nm. The concentration of free carriers in the ZnO/Ag/Fe/Cu films was approximately 10²¹ cm⁻³. ZnO/Ag/Fe/Cu films, can be integrated into optoelectronic devices as functional elements.

Известия НАН Армении, Физика, т.60, №4, с.572–579 (2025)

УДК 662.769

DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.4-572

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ЭТОКСИЛЬНОГО РАДИКАЛА И ЕГО КОНФОРМЕРОВ

М.А. ЭВИНЯН, А.А. АРУТЮНЯН*, А.Г. ДАВТЯН, С.Д. АРСЕНТЬЕВ

Институт химической физики им. А.Б. Налбандяна НАН Армении, Ереван, Армения

*e-mail: harhasmik@mail.ru

(Поступила в редакцию 22 июля 2025 г.)

Вычислительными методами квантовой химии исследованы энергетические пути возможных реакций этоксильного радикала и его конформеров. Показано, что возможно существование изомеров радикала с общей формулой C_2H_5O . При этом, глобальным энергетическим минимумом системы является полная энергия радикала *anti*-CH₃CHON. Расчёты путём найдены переходные состояния для реакций, приводящих к образованию винилового спирта, оксида этилена, ацетальдегида и определены их термохимические параметры.

1. Введение

Развитие различных квантово-химических методов, увеличение мощностей компьютерных систем и появление различных программных комплексов в последние годы создают возможность применения теоретических методов квантовой физики для описания всё более широкого спектра химических систем. Методы квантово-химического моделирования химических процессов позволяют изучать свойства и строение молекулярных структур. При этом появляется возможность получать достаточно точную информацию относительно энергетических и структурных параметров химических систем без проведения сложных дорогостоящих экспериментов.

При изучении процессов окислительного превращения углеводородов и решении прикладных задач газохимии и горения возникает необходимость получения детальной и надёжной информации о термохимических и структурных параметрах реагентов и продуктов указанных процессов. Установление механизмов этих процессов является актуальной задачей и при решении прикладных задач [1].

При окислительных превращениях простейших парафиновых и олефиновых углеводородов в наибольших концентрациях образуются алкилпероксидные радикалы RO₂, играющие определяющую роль в процессах окисления метана, этана, пропана, бутана, этилена, пропилена [2, 3]. Образование основных продуктов при окислении углеводородов принято объяснять реакциями алкохильных радикалов RO, которые образуются в результате взаимодействия алкилпероксидных радикалов друг с другом или олефином. В частности, как показано в [2], источником алкохильных радикалов при окислении метана является квадратичное взаимодействие метилпероксидных радикалов между собой, а при окислении этилена – реакция пероксидных радикалов с этиленом. Несмотря на важную роль

реакций алcoxильных радикалов в процессах образования практически значимых органических продуктов, элементарные реакции этих радикалов изучены недостаточно полно. Исследование процессов изомеризации и распадов радикалов C_2H_5O , C_2H_4OH и CH_3CHON представляется важным также из-за возможности выявления механизмов и альтернативных каналов получения таких ценных оксигенатов как метанол, этанол, формальдегид, ацетальдегид, оксиды этилена и пропилена. Теоретические исследования различных изомеров радикалов с общей формулой C_2H_5O различными квантово-химическими методами проведены в работах [4, 5].

Информация о величинах структурных и термохимических параметров этоксильного радикала и его возможных изомеров важна также и при изучении процессов в атмосферной химии и при контроле загрязнения окружающей среды, т.к. при использовании этанола в качестве топлива в процессе его горения также образуются радикалы RO (C_2H_5O).

Основной целью работы является получение дополнительной информации о структурах и термохимических параметрах экстремумов на сечениях поверхности потенциальной энергии (ППЭ) системы, соответствующей радикалам с общей формулой C_2H_5O , а также о путях их изомеризации и распада.

2. Вычислительные методы

Для расчётов молекулярных структур использовался программный пакет Gaussian 16 [6]. Выбор программы обоснован тем, что данный пакет программ в настоящее время является наиболее мощным инструментом квантово-химических расчётов. Подробная сравнительная характеристика различных вычислительных программ, используемых в данной сфере исследований, таких как Firefly, HyperChem, MOPAC, ORCA, MOLPRO и др. приводится в работе [7]. Визуализация результатов счета осуществлялась программой Gauss View 6.1 [8].

Поиск и локализация стационарных точек на ППЭ системы C_2H_5O проводились в пределах теории функционала плотности DFT гибридными методами B3LYP [9] и M062X [10]. При исследовании реакций, особенно с переходными состояниями, M06-2X превосходит B3LYP по точности. Доля обменного функционала Хартри-Фока равна 54%, что делает метод M06-2X особенно точным при описании нековалентных взаимодействий и переходных состояний. Далее, с целью уточнения значений термохимических параметров, найденные молекулярные структуры пересчитаны композитным CBS-QB3 [11, 12] и *ab initio* MP2 [13] методами. При этом применялись наборы базисных функций 6-311 + G(2d,p) и Aug-CC-pVTZ.

Подобная последовательность применения методов и наборов базисных функций при исследовании реакций с внутримолекулярными переходами и отрывами атома водорода при изомеризации и распаде радикалов удачно применялась нами в работах [14, 15].

Расчёты проводились для $T = 298.15$ К и $P = 1$ атм. Для поиска переходных состояний (ПС) применялись методы Берни и STQN (Synchronous Transit-Guided Quasi-Newton) [16, 17], предусмотренные в программном пакете Gaussian 16. Все локализованные стационарные точки проверялись на соответствие переходному состоянию или локальному минимуму путем анализа частот гармонических колебаний.

Для уточнения продуктов и реагентов, соответствующих найденным переходным состояниям, применяли процедуру расчета внутренней координаты реакции (IRC, intrinsic reaction coordinate), заложенную в программный код Gaussian 16.

3. Результаты и обсуждение

В связи с особой ролью радикала C_2H_5O и его изомеров в процессах окисления углеводородов и горения спиртов были исследованы отдельные участки ППЭ этоксильного радикала, описывающие процессы изомеризации и возможные энергетические пути распада изомеров C_2H_5O . На ППЭ системы C_2H_5O изучены также различные энергетические пути реакций отрыва атома Н от локализованных изомеров радикала C_2H_5O , приводящие к образованию винилового спирта, ацетальдегида и оксида этилена.

Особое внимание было уделено следующим реакциям:



На рис.1 приведена диаграмма полной энергии системы, отражающей превращения радикала C_2H_5O , соответствующие реакциям (1)–(6). Значения полных энергий ($E_{el} + E_{thermal}$) указаны относительно полной энергии C_2H_5O . Здесь и далее

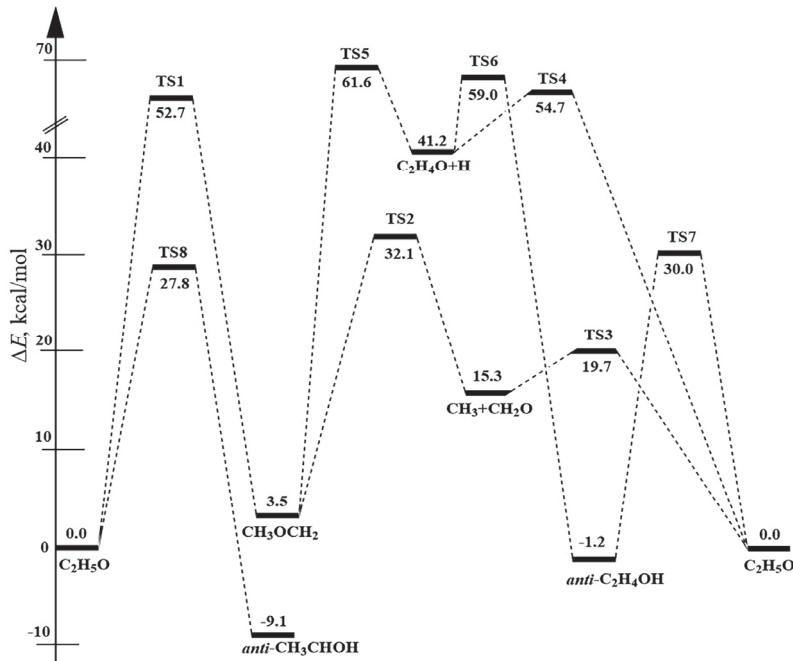


Рис.1. Сечения ППЭ системы C_2H_5O , соответствующие реакциям (1)–(6), рассчитанные методом M062X/aug-cc-pVTZ для $T = 298.15$ К и $P = 1$ атм.

в тексте приводятся результаты расчётов, полученные гибридным методом теории функционала плотности (DFT) M062X с набором базисных функций aug-cc-pVTZ.

Как видно из рис.1, глобальным энергетическим минимумом системы является полная энергия радикала *anti*-CH₃CH₂OH. Значения энергий остальных интермедиатов даны относительно энергии радикала C₂H₅O. Наряду с радикалами CH₃CH₂OH и CH₂CH₂OH был локализован также метоксиметильный радикал CH₃OCH₂. Из диаграммы видно также, что CH₃OCH₂ может образоваться из C₂H₅O, для чего требуется энергия активации (E_a), равная 52.7 ккал/моль. На рис.1 представлены также энергетические профили реакций распада CH₃OCH₂ на CH₂O+CH₃ по реакции (2), или C₂H₄O+H по реакции (3) с E_a = 28.6 и 19.7 ккал/моль, соответственно, а для распада C₂H₅O на те же продукты требуется E_a = 54.7 и 58.1 ккал/моль, соответственно (реакции 4 и 5). Изучены также сечения ППЭ, соответствующие реакциям изомеризации C₂H₅O в CH₂CH₂OH с E_a = 30.0 ккал/моль с последующим распадом на оксид этилена и атом водорода по реакции (6) с E_a = 60.2 ккал/моль.

Для изомеризации C₂H₅O в CH₃OCH₂ по реакции (1) найдено переходное состояние (TS1), структура которого представлена на рис.2. Были определены сечения ППЭ для реакций распада CH₃OCH₂ на метильный радикал и формальдегид – реакция (2), а также на оксид этилена и атом водорода – реакция (3). Локализованы и определены структуры переходных состояний (TS2 и TS3) этих реакций (см. рис.1). Рассчитаны также энергетические пути образования тех же продуктов в результате распада радикала C₂H₅O по реакциям 4 и 5 и соответствующие им переходные состояния TS4 и TS5 (см. рис.2).

На ППЭ системы C₂H₅O изучен также энергетический путь образования оксида этилена из CH₂CH₂OH по реакции (6).

В табл.1 приводятся значения E_a для реакций (1)–(6), рассчитанные для $T = 298.15$ К и $P = 1$ атм различными методами.

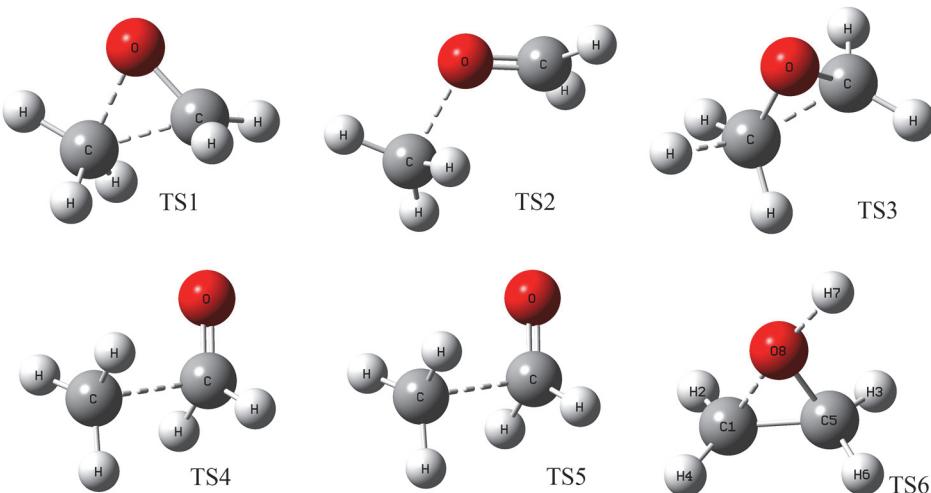


Рис.2. Структуры переходных состояний реакций (1)–(6), полученные методом M06-2X с применением базисного набора aug-cc-pVTZ, $T = 298.15$ К и $P = 1$ атм.

Табл.1. Энергии активации реакций (1)–(6), рассчитанные методами M062X, MP2(full) и CBS-QB3

Реакция	E_a , ккал/моль				
	M062X/ 6-311 + G(2d,p)	MP2-Full/ 6-311 + G(2d,p)	M062X/ aug-cc- pVTZ	MP2-Full/ aug-cc- pVTZ	CBS- QB3
$\text{C}_2\text{H}_5\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2$	54.1	53.6	52.7	51.2	50.5
$\text{CH}_3\text{OCH}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{CH}_3$	28.2	36.1	28.6	37.7	26.0
$\text{CH}_3\text{OCH}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{O} + \text{H}$	20.1	21.9	19.7	21.0	16.2
$\text{C}_2\text{H}_5\text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{CH}_3$	56.4	54.2	54.7	51.1	52.2
$\text{C}_2\text{H}_5\text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{O} + \text{H}$	58.4	61.0	58.1	58.9	57.9
$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{O} + \text{H}$	61.5	62.5	60.2	60.3	58.9

Анализ данных табл.1 указывает на то, что метод MP2-Full переоценивает E_a для распада метоксиметильного радикала на CH_2O и CH_3 приблизительно на 10 ккал/моль. Из рис.1 и данных табл.1 видно также, что для образования оксида этилена требуется больше энергии, чем для реакций, приводящих к образованию CH_2O (~30 ккал/моль).

Расчёты показали также, что энергии активации внутримолекулярных переходов атомов Н между атомами С–С в реакциях $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{CHON}$ должны быть порядка 50 ккал/моль, а между С–О в реакциях изомеризации $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$ в $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ и CH_3CHON – 30 ккал/моль. Для *anti-gauche* конформации радикалов $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ и CH_3CHON требуется E_a – 1–3 ккал/моль, что хорошо согласуется с энергиями вращения функциональной группы вокруг молекулярной связи.

Определённые в результате расчётов относительные к изомеру *anti*- CH_3CHON энталпии (ΔH) всех локализованных нами переходных состояний реакций, рассчитанные различными методами представлены в табл.2.

В реакциях, описывающих отрывы атомов Н, приводящие к образованию *anti*- и *gauche*- конформеров винилового спирта и ацетальдегида E_a должны быть порядка 30–40 ккал/моль, а к оксиду этилена – 60–70 ккал/моль, что говорит о большей вероятности образования альдегидов и спиртов.

Следует отметить, что методами B3LYP и CBS-QB3 не удалось локализовать переходные состояния (ПС) для реакций отрыва атома водорода от конформеров радикала CH_3CHON . Анализ данных таблицы указывает на то, что применённые методы в среднем одинаково оценивают энергетические параметры исследованных структур.

4. Заключение

Методами квантово-химических расчетов исследована поверхность потенциальной энергии этоксильного радикала. Показано, что методы B3LYP, M062X, MP2(full) и CBS-QB3 при расчете исследованной системы дают достаточно близкие результаты, что позволяет использовать наименее ресурсоемкие из них, в

Табл.2. Значения энталпий локализованных переходных состояний относительно *anti*-CH₃CHOH, рассчитанные методами B3LYP, M062X, CBS-QB3 и MP2

Transition states of reactions	ΔH , kcal/mol						
	Calculation with the 6-311+G(2d,p) basis set			Calculation with the aug-cc-pVTZ basis set			CBS-QB3
	B3LYP	M06-2X	MP2-Full	B3LYP	M06-2X	MP2-Full	
CH ₃ OCH ₂ →C ₂ H ₅ O	60.6	62.2	67.2	60.6	61.8	66.1	60.6
<i>gauche</i> -C ₂ H ₄ OH→ <i>anti</i> -C ₂ H ₄ OH	8.6	8.0	7.8	8.8	8.1	7.6	8.1
C ₂ H ₅ O→ <i>gauche</i> -C ₂ H ₄ OH	37.2	39.1	43.0	37.5	39.1	42.3	38.0
C ₂ H ₅ O→ <i>anti</i> -CH ₃ CHOH	36.4	37.1	40.3	36.4	36.9	39.6	37.2
<i>gauche</i> -CH ₃ CHOH→ <i>gauche</i> -C ₂ H ₄ OH	45.1	45.4	47.5	44.8	45.1	45.8	46.0
<i>gauche</i> -CH ₃ CHOH→ <i>anti</i> -CH ₃ CHOH	3.1	2.7	3.1	3.1	2.6	3.0	3.0
<i>anti</i> -CH ₃ CHOH→ <i>anti</i> -C ₂ H ₄ OH	44.7	45.1	47.0	44.5	44.9	45.5	45.6
CH ₃ OCH ₂ →CH ₃ +CH ₂ O	34.6	41.0	50.3	35.0	41.2	51.9	38.9
<i>anti</i> -C ₂ H ₄ OH→C ₂ H ₄ +OH	30.0	35.8	43.0	30.5	36.4	44.7	33.8
<i>gauche</i> -C ₂ H ₄ OH→ <i>gauche</i> -CH ₂ CHOH+H	39.9	41.0	44.5	39.7	40.9	44.2	39.3
<i>anti</i> -C ₂ H ₄ OH→C ₂ H ₄ O+H	67.1	69.3	70.0	66.5	68.1	67.7	66.8
<i>anti</i> -C ₂ H ₄ OH→ <i>anti</i> -CH ₂ CHOH+H	40.3	41.5	45.1	40.0	41.3	44.9	39.4
C ₂ H ₅ O→C ₂ H ₄ O+H	64.8	64.5	67.8	64.4	63.8	66.0	62.2
C ₂ H ₅ O→CH ₃ CHO+H	30.4	32.2	36.5	31.1	32.8	37.6	30.1
<i>gauche</i> -CH ₃ CHOH→ <i>g</i> -CH ₂ CHOH+H	—	37.7	40.7	—	37.5	40.5	—
<i>anti</i> -CH ₃ CHOH→ <i>anti</i> -CH ₂ CHOH+H	—	39.0	42.0	—	38.9	41.9	—
<i>gauche</i> -CH ₃ CHOH→CH ₃ CHO+H	32.3	36.3	41.0	32.7	36.3	41.5	34.6
<i>anti</i> -CH ₂ CH ₂ OH→CH ₂ CH+H ₂ O	33.7	80.3	80.0	76.7	80.1	79.0	81.3
<i>anti</i> -CH ₃ CHOH→CH ₂ CH+H ₂ O	73.1	74.8	74.4	72.9	74.4	73.0	76.5
CH ₃ OCH ₂ →C ₂ H ₄ O+H	72.5	71.3	75.2	72.0	70.6	73.1	70.8
C ₂ H ₅ O→CH ₃ +CH ₂ O	24.5	28.3	34.5	25.0	28.8	36.0	26.2

частности M062X. Определены энергетические пути образования, изомеризации и распада различных конформеров. Наряду с *gauche*- и *anti*- конформерами радикалов C₂H₄OH и CH₃CHOH на поверхности потенциальной энергии радикала C₂H₅O локализован также более стабильный по отношению к C₂H₅O ($\Delta H=0.6$ ккал/моль) метоксиметильный радикал CH₃OCH₂. Рассчитаны энергетические

параметры реакций распада CH_3OCH_2 на метильный радикал и формальдегид, а также на оксид этилена и атом водорода. Рассчитаны энергии активации этих реакций. На исследованной ППЭ этоксильного радикала определены энергетические пути и переходные состояния для реакций, приводящих к образованию винилового спирта, оксида этилена, ацетальдегида и формальдегида.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

ЛИТЕРАТУРА

1. N.M. Pogosyan, M.Dj. Pogosyan, S.D. Arsentiev, L.A. Tavadyan, L.N. Strekova, V.S. Arutyunov. *Petroleum Chemistry*, **60**, 316 (2020).
2. A.A. Mantashyan, L.A. Khachatryan, O.M. Niazyan, S.D. Arsentyev. *Combust. and Flame.*, **43**, 221 (1981).
3. R.R. Grigoryan, S.D. Arsentev. *Petroleum Chemistry*, **60**, 187 (2020).
4. A.E. Williams, N.I. Hammer, G.S. Tschumper. *J. Chem. Phys.*, **155**, 114306 (2021).
5. X. Wang, L. Ye, X. Zhang, Z. Zhang, J. Yang, L. Zhao. *Combust. Flame*, **250**, 112634 (2023).
6. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A.V. Marenich, J. Bloino, B.G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H.P. Hratchian, J.V. Ortiz, A.F. Izmaylov, J.L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V.G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J.A. Montgomery Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. J. Bearpark, J.J. Heyd, E.N. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, T.A. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A.P. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J.M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J.B. Foresman, D.J. Fox, Gaussian 16, (Gaussian, Inc., Wallingford, CT, 2016).
7. G.Yu. Kolchina, I.I. Khasanov, E.A. Loginova, O.Yu. Poletaeva, A.Yu. Bakhtina. *Oil and Gas Chemistry*, **4**, 10 (2018).
8. R. Dennington, T.A. Keith, & J.M. Millam. GaussView, Version 6.1. Semichem Inc., Shawnee Mission KS. (2016).
9. A.D. Becke. *J. Chem. Phys.*, **98**, 5648 (1993).
10. Y. Zhao and D.G. Truhlar. *Theor. Chem. Account*, **120**, 215 (2008).
11. J.A. Montgomery Jr, M.J. Frisch, J.W. Ochterski, G.A. Petersson. *J. Chem. Phys.*, **110**, 2822 (1999).
12. J.A. Montgomery Jr, M.J. Frisch, J.W. Ochterski, G.A. Petersson. *J. Chem. Phys.*, **112**, 6532 (2000).
13. M. Head-Gordon, J.A. Pople, M.J. Frisch. *Chem. Phys. Lett.*, **153**, 503 (1988).
14. A.H. Davtyan, Z.H. Manukyan, S.D. Arsentev, L.A. Tavadyan, V.S. Arutyunov. *Russ. J. Phys. Chem. B*, **18**, 461 (2024).
15. H.A. Harutyunyan, S.D. Arsentev, A.H. Davtyan. *J. Contemp. Phys.*, **60**, 290 (2025).

16. **C. Peng, P.Y. Ayala, H.B. Schlegel, M.J. Frisch.** J. Comp. Chem., **17**, 49 (1996).

17. **C. Peng, H.B. Schlegel.** Israel J. Chem., **33**, 449 (1993).

ԷԹՈՔՍԻԼԱՅԻՆ ՈԱԴԻԿԱԼԻ ԵՎ ԴՐԱ ԿՈՆՖՈՐՄԵՐՆԵՐԻ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼ
ԷՆԵՐԳԻԱՅԻ ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅԹԻ ՔՎԱՆՏԱՔԻՄԻԱԿԱՆ
ՈՒՍՈՒՄՆԱՍԻՐՈՒԹՅՈՒՆ

Մ.Ա. ԷՎԻՆՅԱՆ, Հ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Ա.Հ. ԴԱՎՏՅԱՆ, Ս.Դ. ԱՐՍԵՆԵՎ

Քվանտաքիմիայի հաշվարկային մեթոդներով ուսումնասիրվել են էթոքսիլային ռադիկալ և դրա կոնֆորմերների հնարավոր ռեակցիաների էներգետիկ ուղիները: Ցուցադրվել է, որ C_2H_5O ընդհանուր բանաձևով ռադիկալի իզոմերների գոյությունը հնարավոր է: Այս դեպքում համակարգի ΨE -ի վրա գլոբալ նվազագույն էներգիան հանդիսանում է *anti*- CH_3CHOH ռադիկալի ընդհանուր էներգիան: Հաշվարկների միջոցով հայտնաբերվել են անցումային վիճակները այն ռեակցիաների համար, որոնք բերում են վինիլային աղիքտի, էթիլենի օքսիդի, ացետալեհիդի առաջացմանը և որոշվել են դրանց թերմոքիմիական պարամետրերը:

QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF THE POTENTIAL ENERGY SURFACE OF THE ETHOXYL RADICAL AND ITS CONFORMERS

M.A. EVINYAN, H.A. HARUTYUNYAN, A.H. DAVTYAN, S.D. ARSENTEV

The energy pathways of possible reactions of the ethoxyl radical and its conformers were studied using computational methods of quantum chemistry. It was shown that isomers of the radical with the general formula C_2H_5O may exist. In this case, the global energy minimum of the system is the total energy of the *anti*- CH_3CHOH radical. Transition states for reactions leading to the formation of vinyl alcohol, ethylene oxide, and acetaldehyde were found by calculation and their thermochemical parameters were determined.

Известия НАН Армении, Физика, т.60, №4, с.580–589 (2025)

УДК 577.3; 547.963.3

DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.4-580

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВОДЫ И ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ДНК ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ НЕТЕПЛОВЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН МИЛЛИМЕТРОВОГО ДИАПАЗОНА

В.П. КАЛАНТАРЯН¹, Р.С. КАЗАРЯН¹, Н.Г. КАРАПЕТЯН¹,
Г.В. АНАНЯН^{1*}, М. Л. МОВСИСЯН¹, Ю.С. БАБАЯН²

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Национальный университет архитектуры и строительства Армении, Ереван, Армения

*e-mail: angay@ysu.am

(Поступила в редакцию 1 октября 2025 г.)

Исследовано влияние низкоинтенсивных нетепловых электромагнитных волн миллиметрового диапазона (ММЭМВ) на поверхностные и объемные свойства воды, солевых растворов и растворов ДНК. Показано, что ММЭМВ, совпадающие по частоте с резонансными частотами колебаний водных структур, проявляют определенный эффект *in vivo* и *in vitro* [1–3], воздействуя на живые организмы через водную составляющую среды. ММЭМВ проникают в более глубокие слои растворов, что приводит к дегидратации ионов соли и ДНК и повышению плотности водных растворов. Облучение растворов ДНК низкоинтенсивными колебаниями с частотами, резонансными частотам водных молекулярных структур в течение 90 минут, приводит к повышению термостабильности ДНК примерно на 1°C. Плотность необлученных и облученных растворов уменьшается с повышением температуры. Наблюдается существенное различие в поведении зависимости плотности от температуры для необлученных и облученных солевых растворов и растворов ДНК. Расчеты показывают, что для исследованных растворов коэффициент теплового расширения (α) увеличивается с ростом температуры, причем увеличение α происходит по-разному для водных структур, облученных и не облученных резонансными частотами колебаний.

1. Введение

Многочисленные физические факторы окружающей среды, играющие важную роль в процессах жизнедеятельности, имеют электромагнитную природу. Искусственные электромагнитные волны различных частот оказывают выраженное воздействие на живые организмы и находят широкое практическое применение [4, 5]. Особо актуально изучение возможного неблагоприятного воздействия электромагнитных волн на живые организмы и медико-биологические аспекты их использования в терапевтических целях [5–10]. Одним из актуальных направлений современной магнитобиологии является изучение физико-химических механизмов воздействия электромагнитных волн на биологические системы различных уровней организации. Несмотря на большое количество исследований, посвященных биомедицинским эффектам электромагнитных волн, до сих

пор нет однозначного понимания этих механизмов. В настоящее время электромагнитные волны миллиметрового диапазона (ММЭМВ) нетепловой интенсивности успешно применяются в клинической медицине несмотря на то, что механизмы их действий на биологические объекты до сих пор не ясны.

Обнаружены многочисленные эффекты низкоинтенсивных ММЭМВ на уровне организмов человека и животных, а также воздействие на прокариотические и эукариотические клетки [10–15]. Показано существование как селективных, частотно-зависимых эффектов [10–14], так и «неселективных», не зависящих от частоты воздействия [15]. Однако до настоящего времени основные мишени восприятия этих волн и механизмы их действия в биологических системах остаются невыясненными. В настоящее время всё больше подтверждается концепция, что нетепловые эффекты ММЭМВ в биологических системах обусловлены их воздействием на воду [12, 14–18]. В связи с этим исследования влияния нетепловых интенсивных ММЭМВ на структуру и физико-химические свойства воды и водных растворов биополимеров очень актуальны.

2. Материалы и методы исследований

Плотность бидистиллированной воды, солевого раствора 0.02M NaCl и ДНК (Sigma Aldrich) в растворе 0.02M NaCl определяли на денситометре DMA 4500 Anton Paar (Австрия) с чувствительностью 10^{-5} г/см³. Коэффициент поверхностного натяжения определяли на тензиометре SITA. Облучение растворов проводили в специальной стеклянной ёмкости. Сверху растворы покрывали тонкой пленкой винилхлорида, прозрачной для излучения. В качестве источника ММ-излучения использовали генераторы когерентных крайне высокочастотных колебаний Г4-141 и Г4-142 (Россия). Диапазон частот для Г4-141 составляет 37.5–53.37 ГГц (плотность потока на месте расположения образца составляет 0.6 мВт/см²), а для Г4-142 соответственно 53.3–78.33 ГГц (плотность потока – 50 мкВт/см²). Стабильность частоты сигнала генератора составляла $\pm 0.05\%$. Коническая излучающая антенна расположена на выходе генератора.

Спектры поглощения и кривые плавления ДНК были получены на спектрофотометрах Unicam SP-8-100 (Англия) и Cary-219 (США). Термостатирование проводилось в ячейках термостата с использованием кварцевых кювет с длиной оптического пути 10 мм и герметичными крышками. Точность измерения температуры составляла $\pm 0.05^\circ\text{C}$, поглощения – 10^{-4} оптических единиц. Каждый день перед измерениями готовили 25 мл раствора ДНК (из расчета на шесть измерений) с концентрацией около 10^{-4} М/Р. Кривые плавления ДНК, т.е. изменение поглощения в зависимости от температуры при длине волны 260 нм, снимали путем непрерывного нагревания растворов ДНК со скоростью $0.25^\circ\text{C}/\text{мин}$. Концентрация ДНК в водно-солевых растворах составляла 6×10^{-8} г/см³. В таблицах представлены средние арифметические значения шести независимых измерений. Для облучения использовались частоты 50.3 и 64.5 ГГц (которые совпадают с резонансными частотами колебаний молекулярных структур гексагональных и тригональных структур воды), а также частота 48.3 ГГц, не совпадающая с резонансными частотами [16].

3. Результаты и обсуждение

3.1. Влияние миллиметрового электромагнитного излучения нетепловой интенсивности на поверхностные и объемные свойства водных растворов

Известно, что поверхностный слой воды и водных растворов сильно поглощает ММЭМВ. Поэтому было изучено поведение коэффициента поверхностного натяжения (σ) бидистиллированной воды, водно-солевого раствора и растворов ДНК в зависимости от температуры при облучении образцов в течение 90 минут ММЭМВ нетепловой интенсивности с резонансными (50.3 и 64.5 ГГц) и нерезонансными (48.3 ГГц) частотами колебаний молекулярных структур воды.

Электромагнитное излучение считается нетепловым, если плотность потока мощности не превышает $10\text{МВт}/\text{см}^2$. Эксперименты показали, что коэффициент поверхностного натяжения исследуемых образцов σ не изменяется под воздействием облучения и линейно уменьшается с повышением температуры [17]. Следовательно, поверхностный слой раствора не поглощает нетепловые, слабые ММЭМВ, которые проникают в более глубокие слои жидкости. В результате могут изменяться объемные характеристики растворов, в частности, плотность.

Для определения влияния низкоэнергетических когерентных волн ММЭМВ на физико-химические свойства водных растворов образцы ДНК облучали в течение 30, 40, 60, 90 и 120 мин, после чего определяли плотности облученных и необлученных растворов. Исследования показали, что плотность бидистиллированной воды практически не изменяется при облучении ММЭМВ с частотами 50.3, 64.5 и 48.3 ГГц. Плотность физиологического раствора и раствора ДНК увеличивается при облучении на частотах 50.3 и 64.5 ГГц, и не изменяется при облучении на частоте 48.3 ГГц [17]. Причём увеличение более заметно при облучении на частоте 50.3 ГГц, что совпадает с резонансной частотой колебаний гексагональных структур воды [16]. Увеличение плотности солевого раствора и раствора ДНК составляет примерно $10^{-4}\text{ г}/\text{см}^3$ и происходит преимущественно при облучении до 90 минут. Увеличение плотности солевого раствора и раствора ДНК при облучении частотами 64.5 и 50.3 ГГц вероятнее всего связано с изменением структуры воды под действием облучения, поскольку резонансные частоты ДНК находятся в диапазоне 2–9 ГГц [9, 17]. Для солевого раствора и раствора ДНК наблюдается идентичная динамика изменения плотности [17].

Обобщая приведенные выше экспериментальные данные, можно предположить, что структура бидистиллированной воды не меняется в результате облучения, поскольку в этих условиях молекулы воды образуют термодинамически наиболее устойчивую структуру. Изменение упорядоченности воды после облучения становится термодинамически невыгодным, поэтому плотность воды не должна меняться под воздействием облучения.

При облучении солевого раствора и раствора ДНК происходит дегидратация присутствующих в растворе ионов Na^+ и ДНК. Часть высвобождающихся молекул воды заполняет пустоты гексагональных структур [2, 16, 19, 20], что приводит к увеличению плотности растворов. При этом проявляются полиационные свойства молекулы ДНК.

Таким образом, полученные данные дают основание предположить, что нетепловые ММЭМ волны, совпадающие по частоте с резонансными колебаниями водных структур, оказывают определённый эффект в условиях *in vitro* и

воздействуют на живые организмы через водную составляющую среды. Поверхностный слой водных растворов их не поглощает, они проникают в более глубокие слои жидкости и приводят к дегидратации ионов, присутствующих в растворе, что обуславливает увеличение плотности растворов.

3.2. Влияние нетеплового электромагнитного излучения миллиметрового диапазона на некоторые свойства растворов ДНК

Исследовалось влияние низкоэнергетических когерентных ММЭМ волн на термостабильность ДНК. Получены кривые плавления необлученных и облученных в течение 30, 40, 60, 90 и 120 минут растворов ДНК. Определены основные характеристики плавления: температура плавления T_m и интервал плавления ΔT (табл.1). Кривые плавления получены сразу после облучения растворов, а также через 10 и 24 часа после облучения. Исследования показали, что форма кривых плавления и параметры плавления T_m и ΔT не изменяются в исследованных временных интервалах через 10 и 24 часа (изменения находятся в пределах погрешности эксперимента).

Табл.1. Температура плавления (T_m) и интервал плавления (ΔT) ДНК, облученной ММЭМВ в растворе с $[\text{Na}^+] = 0.02$

Время облучения, мин	0	30	40	60	90	120
Частота облучения 64.5 ГГц						
T_m , °C	69.4±0.1	69.4±0.1	69.5±0.1	69.7±0.1	70.3±0.1	70.3±0.1
ΔT , °C	7.2±0.2	7.2±0.2	7.1±0.2	7.1±0.1	7.0±0.1	6.9±0.2
Частота облучения 50.3 ГГц						
T_m , °C	69.4±0.1	69.5±0.1	69.6±0.1	69.8±0.1	70.3±0.1	70.4±0.1
ΔT , °C	7.2±0.2	7.1±0.2	7.1±0.2	7.1±0.2	7.0±0.2	7.0±0.2
Частота облучения 48.3 ГГц						
T_m , °C	69.4±0.1	69.4±0.1	69.5±0.1	69.5±0.1	69.6±0.1	69.6±0.1
ΔT , °C	7.2±0.2	7.1±0.2	7.1±0.2	7.2±0.1	7.2±0.2	7.1±0.2

Также установлено, что изменение pH растворов ДНК при облучении находится в пределах погрешности эксперимента ($pH 7.3 \pm 0.02$). Было установлено, что в зависимости от времени облучения растворов волнами с частотой 50.3 ГГц (резонансные частоты колебаний гексагональных структур воды) и 64.5 ГГц (резонансные частоты колебаний триадных структур воды) [16], термостабильность T_m ДНК увеличивается (табл.1).

Как следует из табл.1, с увеличением времени облучения растворов ДНК T_m увеличивается примерно на 1°C, а ΔT незначительно уменьшается (в пределах погрешности эксперимента). Поскольку резонансные частоты поглощения ДНК

находятся в диапазоне 2–9 ГГц [9, 17], можно предположить, что при облучении с резонансными частотами (64.5 и 50.3 ГГц) изменения значений T_m и ΔT обусловлены опосредованным через воду воздействием облучения на ДНК. Этот факт подтверждается экспериментами, где сначала облучался только солевой раствор, а затем готовились образцы ДНК в облученном растворе. Полученные для данных образцов кривые плавления практически не отличаются от кривых, полученных при облучении растворов ДНК. Растворы ДНК также облучались на нерезонансной частоте колебаний молекулярных структур воды 48.3 ГГц. Как видно из табл.1, параметры плавления практически не изменяются.

Следовательно, можно предположить, что наблюдаемые изменения параметров плавления ДНК, облученной на частотах, резонансных для колебаний структур воды, обусловлены именно изменениями структуры воды, возникающими в результате облучения. Следует отметить, что полученные данные по плавлению ДНК хорошо согласуются с данными денситометрии [17]. Согласно предложенной выше версии, происходит дегидратация ионов Na^+ , в результате чего они более эффективно экранируют отрицательно заряженные фосфатные группы ДНК, что увеличивает термостабильность ДНК (табл.1).

Исследования зависимости плотности бидистилированной воды, солевого раствора и раствора ДНК от температуры после облучения на резонансной частоте 50.3 ГГц в течение 90 мин показали, что плотность исследуемых облученных и необлученных растворов уменьшается с ростом температуры (табл.2). Однако наблюдается существенное различие в поведении зависимости $\rho(T)$ для облученных и необлученных растворов ДНК. На рис.1 представлена зависимость

Табл.2. Плотность (ρ) необлученных и облученных (50.3 ГГц) бидистилированной воды, солевого раствора и растворов ДНК при различных температурах

$T, \text{ К}$	$\rho, \text{ г/см}^3$					
	Необлученный раствор			Облученный раствор		
	Бидистил. вода	Солевой раствор	Раствор ДНК	Бидистил. вода	Солевой раствор	Раствор ДНК
293.15	0.99820	0.99921	0.99923	0.99820	0.99932	0.99938
303.15	0.99568	0.99587	0.99588	0.99567	0.99599	0.99608
313.15	0.99225	0.99238	0.99236	0.99227	0.99249	0.99258
318.15	0.99025	0.99056	0.99062	0.99024	0.99064	0.99063
323.15	0.98807	0.98858	0.98858	0.98810	0.98866	0.98847
328.15	0.98573	0.98610	0.98610	0.98572	0.98620	0.98588
333.15	0.98324	0.98400	0.98400	0.98325	0.98412	0.98367
338.15	0.98060	0.98132	0.98132	0.98062	0.98133	0.98095
343.15	0.97782	0.97800	0.97815	0.97780	0.97818	0.97777
348.15	0.97692	0.97793	0.97812	0.97693	0.97802	0.97809
350.15	0.97687	0.97787	0.97808	0.97687	0.97796	0.97848

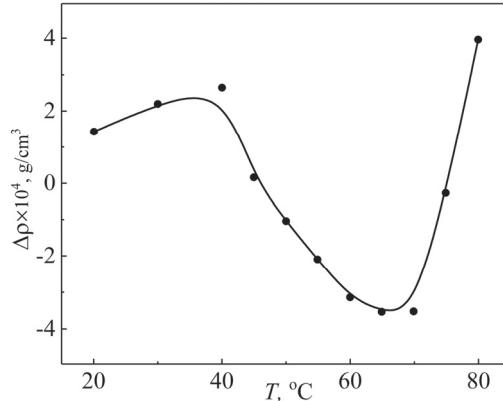


Рис.1. Зависимость разности плотностей ($\Delta\rho$) раствора ДНК, облученного частотой 50.3 ГГц в течение 90 мин, и необлученного раствора ДНК от температуры.

разности плотностей $\Delta\rho(T)$ облученных и необлученных растворов ДНК от температуры. Аналогичная зависимость получена при облучении на частоте 64.5 ГГц. Как видно из рис.1, $\Delta\rho$ незначительно увеличивается в диапазоне температур $20^\circ\text{C} \leq T \leq 40^\circ\text{C}$ и уменьшается в диапазоне $40^\circ\text{C} \leq T \leq 70^\circ\text{C}$. При дальнейшем повышении температуры ($T > 70^\circ\text{C}$) $\Delta\rho$ резко увеличивается, в результате чего на кривой зависимости $\Delta\rho$ от T наблюдается минимум при температуре около 70°C , что соответствует температуре плавления ДНК (табл.1).

Плавление ДНК происходит при температурном диапазоне $60^\circ\text{C} < T < 85^\circ\text{C}$. Такое поведение кривой $\Delta\rho(T)$ может быть связано с тем, что с ростом температуры степень дегидратации облученной ДНК увеличивается по сравнению с необлученной. При $T = 70^\circ\text{C}$, когда расплавлена половина азотистых оснований ДНК, уменьшение степени гидратации облученной ДНК наибольшее. Дальнейшее повышение температуры приводит к резкому увеличению $\Delta\rho$. Резкое увеличение $\Delta\rho$ при $T > 70^\circ\text{C}$ можно объяснить тем обстоятельством, что в денатурированном, одноцепочечном состоянии молекула облученной ДНК более гидратирована, чем необлученная молекула. Одноцепочечные облученные молекулы ДНК, вероятно, становятся «центрами кристаллизации» свободных молекул воды, в результате чего плотность системы «вода—облученная одноцепочечная ДНК» увеличивается по сравнению с необлученной ДНК. Мы предполагаем, что при облучении на резонансных частотах (50.3 и 64.5 ГГц) часть «свободных» молекул воды, входивших в состав гидратной оболочки ДНК, высвобождается после облучения, что приводит к резкому снижению плотности системы «вода—ДНК», поскольку в случае необлученной ДНК аналогичное явление не происходит. Плотность последней претерпевает незначительное изменение. В дальнейшем, с повышением температуры увеличивается лабильность как макромолекулы, так и гексагональных структур воды, в результате чего, по всей вероятности, эти структуры включаются в состав гидратной оболочки макромолекулы, и плотность этой системы увеличивается.

Основываясь на значениях плотностей бидистилированной воды, солевого раствора и раствора ДНК необлученных и облученных на частотах 64.5 и 50.3 ГГц в диапазоне температур 20–76°C, был рассчитан коэффициент теплового расширения α по следующей формуле [21]:

$$\alpha(T) = -\frac{1}{\rho} \times \frac{d\rho(T)}{dT} = -\frac{d \ln \rho(T)}{dT}. \quad (1)$$

Используя значения плотности исследуемых растворов при различных температурах после облучения в течение 90 минут (табл.2), был рассчитан коэффициент теплового расширения. Наименьший коэффициент теплового расширения наблюдается для бидистиллированной воды, что объясняется структурными особенностями воды. В жидкой фазе молекулы воды образуют ассоциаты. Поскольку вода имеет гексагональную структуру, часть свободных молекул проникает в пустоты гексагональных структур [19, 20, 22]. Для исследуемых растворов с повышением температуры наблюдается увеличение α .

Увеличение молярного объема можно объяснить вытеснением части молекул воды из пустот гексагональной структуры и увеличением количества линейных водородных связей [21]. Увеличение α с повышением температуры происходит по-разному для исследуемых растворов. Увеличение α более значимо для солевого раствора при температурах выше 50°C. В диапазоне температур 20–50°C облучение исследуемых растворов колебаниями резонансными частотами для водных структур практически не влияет на значения α . При температурах выше 50°C коэффициент теплового расширения α облученных образцов меньше, чем соответствующих необлученных растворов. На рис.2 представлены зависимости изменения коэффициента теплового расширения (α) под воздействием облучения для бидистиллированной воды (1) и растворов ДНК, облученных резонансными частотами 50.3 (2) и 64.5 ГГц (3).

Из рис.2 видно, что поведение $\Delta\alpha(T)$ практически одинаково для растворов ДНК, облученных на разных резонансных частотах, и существенно отличается от аналогичной зависимости для бидистиллированной воды. Полученные экспериментальные данные можно объяснить предположив, что структурные изменения, происходящие в воде под действием облучения, затрудняют образование линейных водородных связей вследствие повышения температуры.

Наличие максимума на всех кривых зависимостей $\Delta\alpha(T)$ (рис.2) позволяет предположить существование некоего оптимального соотношения между частотой облучения и энергией образования водородных связей в воде.

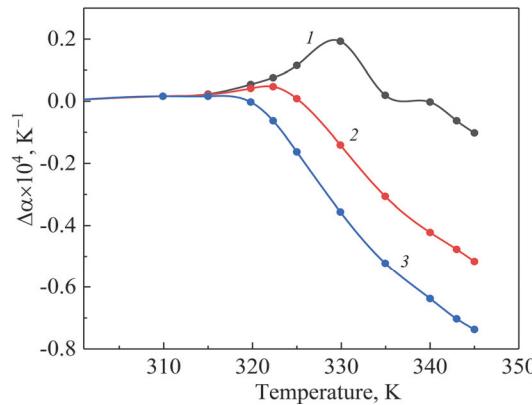


Рис.2. Кривые зависимости разности коэффициентов теплового расширения $\Delta\alpha$ от температуры для необлученных и облученных в течение 90 мин растворов: 1 – вода, облученная с частотой 50.3 ГГц; 2 – растворы ДНК, облученные с частотой 50.3 ГГц; 3 – растворы ДНК, облученные с частотой 64.5 ГГц.

4. Заключение

В работе исследованы изменения молекулярной структуры воды под воздействием облучения, а также поведение физических свойств молекулы ДНК, в частности термической стабильности, в зависимости от частоты и времени воздействия облучения. Полученные данные свидетельствуют о том, что миллиметровые электромагнитные волны нетепловой интенсивности, резонансные для колебаний молекулярных структур воды, не поглощаются поверхностным слоем солевых растворов, а проникают в более глубокие слои. В результате в молекулярной структуре воды происходят определенные изменения, приводящие к увеличению плотности солевого раствора и изменению зависимости коэффициента теплового расширения от температуры. Показано, что разница в коэффициентах теплового расширения облученных и необлученных растворов в зависимости от температуры количественно по-разному меняется для бидистиллированной воды и солевого раствора.

Предлагаемый в данной работе подход заключается в том, что, изучая возможные структурные изменения молекулы ДНК под воздействием радиации, можно составить представление о возможных изменениях молекулярной структуры воды. Известно, что резонансные частоты колебаний молекул ДНК находятся в диапазоне 2–9 ГГц. Следовательно, наблюдаемое повышение термостабильности ДНК при воздействии частот 64.5 и 50.3 ГГц обусловлено их влиянием на молекулярные структуры воды, которые косвенно влияют на термостабильность ДНК. В результате исследования термостабильности молекулы ДНК установлено, что изменения в молекулярной структуре воды под воздействием радиации сохраняются не менее 24 часов. При этом повышение термостабильности ДНК под воздействием радиации не зависит от того, подвергалась ли система вода–ДНК облучению или ДНК была растворена в облученной воде. Полученные результаты свидетельствуют о том, что низкоинтенсивные электромагнитные волны миллиметрового диапазона оказывают специфическое действие *in vitro* и могут опосредованно влиять на биологические системы через воду. Поскольку термодинамические свойства воды определяются прежде всего образованием водородных связей между ее молекулами, можно предположить, что облучение миллиметрового диапазона инициируется именно их образованием и влияет на кластеризацию воды. В то же время полученные результаты свидетельствуют о том, что влияние ММЭМВ на структуру и функциональные характеристики биомакромолекул может быть существенным при различных патологических состояниях биосистемы.

Авторы сообщают об отсутствии конфликта интересов, требующего заявления.

Работа выполнена при поддержке Комитета по науке РА в рамках гранта № 25RG-1F152.

ЛИТЕРАТУРА

1. I.Y. Belyaev, V.S. Shcheglov, Y.D. Alipov, V.A. Polunin. Bioelectromagnetics, **17**, 312 (1996).
2. E.E. Fesenko, A.Ya. Gluvstein. FEBS Letters, **367**, 53 (1995).
3. D.F. Zou, Z.H. Li, Y.B. Liu, C.Z. Wang. Electromagnetic Biology and Medicine, **44**, 212

(2025).

4. **V.R. Makar, M.K. Logani, A. Bhanushali, M. Kataoka, M.C. Ziskin.** Bioelectromagnetics, **26**, 10 (2005).
5. **M.K. Logani, I. Szabo, V. Makar, A. Bhanushali, S. Alekseev, M.C. Ziskin.** Bioelectromagnetics. **27**, 258 (2006).
6. **L.M. Pall.** Reviews on Environmental Health, **37**, 247 (2022).
7. **H. Wang, L. Lu, P. Liu, J. Zhang, S. Liu, Y. Xie, T. Huo, H. Zhou, M. Xue, Y. Fang, J. Yang, Zh. Ye.** Intelligent Medicine, **4**, 16 (2024).
8. **A.B. Gapeyev, E.N. Mikhailik, N.K. Chemeris.** Bioelectromagnetics, **29**, 197 (2008).
9. **V. Kalantaryan, R. Martirosyan, Yu. Babayan, L. Nersesyan, H. Stepanyan.** American J. Med. Biolog. Research, **2**, 18 (2014).
10. **V. Kalantaryan, R. Martirosyan, Yu. Babayan, P. Vardevanyan.** European J. Med. Phys., **52**, 96 (2018).
11. **V. Kalantaryan, R. Martirosyan, L. Nersesyan, A. Aharonyan, I. Danielyan, H. Stepanyan, J. Gharibyan, N. Khudaverdyan.** Progress In Electromag. Res. Lett., **20**, 97 (2011).
12. **V. Kalantaryan, R. Martirosyan, Yu. Babayan, V. Petrosyan.** Comput. Struct. Biotech. J., **21**, 3437 (2023).
13. **V.R. Makar, M.K. Logani, A. Bhanushali, S.I. Alekseev, M.C. Ziskin.** Bioelectromag., **27**, 458 (2006).
14. **V. Kalantaryan, S. Hakobyan, R. Ghazaryan, R. Martirosyan.** American J. Med. Biol. Res., **4**, 73 (2016).
15. **K.L. Mahendra, A. Bhanushali, A. Anga, A. Majmundar, I. Szabo, M.C. Ziskin.** Bioelectromagnetics, **25**, 516 (2004).
16. **V.I. Petrosyan, N.I. Sinitzin, V.A. Elkin, N.D. Devyatkov, O.V. Betskii.** Biomed. Radioeng., **5**, 62 (2001).
17. **V.P. Kalantaryan, S.N. Hakobyan, Yu.S. Babayan.** J. Contemp. Phys., **52**, 58 (2017).
18. **V.P. Kalantaryan, S.N. Hakobyan, P.O. Vardevanyan.** J. Contemp. Phys., **53**, 175 (2018).
19. **B. Schneider, H.M. Berman.** Biophys. J., **69**, 2661 (1995).
20. **C. Messori.** Open Access Library Journal, **6**, 5435 (2019).
21. **G.I. Egorov, A.A. Syrbu, A.M. Kolker.** Russian J. General Chem., **72**, 693 (2002).
22. **G.M. Kontogeorgis, A. Holster, N. Kottaki, E. Tsochantaris, E. Topsoe, J. Poulsen, M. Bache, X. Liang, B.N. Sorgenfrei, J. Kronholm.** Chem. Thermodynamics and Thermal Analysis, **6**, 2667 (2022).

ՈՉ ԶԵՐՄԱՅԻՆ ՄԻԼԻՄԵՏՐԱՅԻՆ ԷԼԵԿՏՐԱՄԱԳՆԻՍԱԿԱՆ ԱԼՔԻՖՆԵՐԻ
ԱԶԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ՈՒՍՈՒՄՆԱՄՐՈՒԹՅՈՒՆԸ ԶՐԻ ԵՎ ԴԱԹ-Ի ԶՐԱՅԻՆ
ԼՈՒՇՈՒՅՑԹՆԵՐԻ ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ՎՐԱ

Վ.Պ. ՔԱԼԱՆԹԱՐՅԱՆ, Ռ.Ս. ՂԱԶԱՐՅԱՆ, Ն.Հ. ԿԱՐԱՊԵՏՅԱՆ,
Գ.Վ. ԱՆԱՆՅԱՆ, Մ.Լ. ՄՈՎՏԻՍՅԱՆ, ՅՈՒ.Ս. ԲԱԲԱՅԱՆ

Ուսումնասիրվել է ցածր ինտենսիվության ոչ ջերմային միջմետրային տիրույթի էլեկտրամագնիսական ալիքների (ՄՄԵՄՎ) ազդեցությունը ջրի, աղային լուծույթների և ԴՆԹ-ի աղային լուծույթների մակերևությային և ծավալային հատկությունների վրա: Ապացուցված է, որ ոչ ջերմային ՄՄԵՎ ալիքները, որոնք հաճախականությամբ համբնյում են ջրային կառուցվածքների տատանումների ռեզոնանսային հաճախականությունների հետ, որոշակի ազդեցություն են ունենում կենդանի օրգանիզմների վրա *in vivo* և *in vitro* պայմաններում [1-3], ազդելով միշավայրի ջրային բաղադրիչի միջոցով: ՄՄԵՎ ալիքները ներթափանցում են լուծույթների ավելի խորը շերտեր, ինչը հանգեցնում է աղի իոնների և ԴՆԹ-ի դեկիդրատացմանը և ջրային լուծույթների խտության աճին: ԴՆԹ-ի ջրային լուծույթների ձառագայթահարումը ցածր ինտենսիվության ռեզոնանսային հաճախականություններով 90 րովե տևողությամբ հանգեցնում է ԴՆԹ-ի ջերմակայունության աճին մոտ 1°C-ով: Ջերմաստիճանի բարձրացմանը զուգընթաց ձառագայթահարված և ձառագայթահարված լուծույթների խտությունը նվազում է: Էական տարբերություն է դիտվում ձառագայթահարված և ձառագայթահարված աղային լուծույթների և ԴՆԹ-ի լուծույթների խտության ջերմաստիճանից կախվածության վարրագծում: Հաշվարկները ցույց են տալիս, որ ջերմային ընդարձակման գործակիցը (α) ուսումնասիրված լուծույթների համար աճում է ջերմաստիճանի բարձրացմանը զուգընթաց, ընդ որում α -ի աճը տարբերվում է ռեզոնանսային տատանումների հաճախականություններով ձառագայթահարված և ձառագայթահարված ջրային կառուցվածքների դեպքում:

PHYSICAL PROPERTIES OF WATER AND AQUEOUS DNA SOLUTIONS
UNDER THE INFLUENCE OF NON-THERMAL ELECTROMAGNETIC
WAVES OF THE MILLIMETER RANGE

V.P. KALANTARYAN, R.S. GHAZARYAN, N.H. KARAPETYAN,
G.V. ANANYAN, M.L. MOVSISYAN, Y.U.S. BABAYAN

The influence of low-intensity non-thermal electromagnetic waves of the millimeter range on the surface and volume properties of water, saline and DNA solutions was studied. It has been shown that non-thermal millimeter electromagnetic waves (MMEMW) coinciding in frequency with the resonant frequencies of oscillations of water structures, produce a certain effect in vivo and in vitro [1-3], affecting living organisms through the aqueous component of the environment. NTEW is not absorbed by the surface layer of aqueous solutions and penetrates deeper layers of liquid, which leads to dehydration of salt ions and DNA and an increase in the density of aqueous solutions. Irradiation of DNA solutions with low-intensity resonance frequencies for aqueous molecular structures for 90 minutes leads to an increase in the thermal stability of DNA by approximately 1°C. As the temperature increases, the density of non-irradiated and irradiated solutions decreases. However, there is a significant difference between the behavior of the density dependence on temperature for non-irradiated and irradiated saline and DNA solutions. Calculations show that for studied solutions, the coefficient of thermal expansion (α) increases with increasing temperature, and the growth of α occurs differently for water structures irradiated and not irradiated with resonant vibration frequencies.

Известия НАН Армении, Физика, т.60, №4, с.590–598 (2025)

УДК 541.64

DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.4-590

К МЕХАНИЗМАМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НЕЙРОТРАНСМИТТЕРА СЕРОТОНИНА С ДНК

М.А. ПАРСАДАНЯН¹, А.П. АНТОНЯН^{1*}, М.А. ШАГИНЯН¹,
А.В. ВАРДАНЯН¹, Г.Г. КОЧАРЯН², М.Н. ГАРИБЯН¹, П.О. ВАРДЕВАНЯН¹

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Институт физической химии им.А. Налбандяна НАН РА, Ереван, Армения

*e-mail: apant@ysu.am

(Поступила в редакцию 19 ноября 2025 г.)

Взаимодействие серотонина с ДНК исследовалось методами флуоресцентной и абсорбционной спектроскопии. Показано, что интенсивность флуоресценции серотонина уменьшается (тушится) при возрастающих концентрациях ДНК в растворе. На основании изменений интенсивностей определены значения констант тушения K_{SV} (константа Штерна–Вольмера) в интервале изменения температуры 298–311 К. Также показано, что спектры поглощения при возрастающих концентрациях серотонина без ДНК увеличиваются в большей степени, чем с ДНК. На основании спектров флуоресценции и поглощения комплексов серотонина с ДНК получены изотермы адсорбции и определены значения константы K связывания и числа пар оснований n , приходящихся на одно место связывания.

1. Введение

Малые молекулы играют решающую роль в физиологических процессах в отдельных клетках или в организме, а также для разработки лекарственных препаратов, влияющих на дезоксирибонуклеиновую кислоту (ДНК). Зачастую ДНК является главной мишенью как эндогенных, так и экзогенных соединений, которые могут непосредственно или опосредовано взаимодействовать с ней и, тем самым, регулировать процессы транскрипции и репликации, контролируя экспрессию генов в конкретных клетках. Среди различных лигандов биомедицинское значение приобрели производные индола – триптофан, серотонин, мелатонин и др., которые широко распространены в природе и отличаются значительными биологическими эффектами [1–5]. С этой точки зрения, экзогенные вещества, в основном ксенобиотики, и многие эндогенные молекулы широко изучаются на предмет их сложных взаимодействий с ДНК или различными белками [1–5]. Нуклеиновые кислоты являются основной мишенью для широкого спектра химических реакций и физических изменений, вызывая структурные, функциональные и информационные неточности, которые накапливаются на ядерном уровне и трансформируются в точки разрыва патогенеза [6–11].

Производные индола, такие как триптофан, триптамин, серотонин, мелатонин, и др. являются одними из наиболее распространённых природных гетероциклических соединений, обладающих высокими биологическими эффектами.

Триптофан – незаменимая аминокислота для клеток человека, ценный структурный компонент белков и предшественник таких биоактивных производных, как важнейший нейромедиатор серотонин и гормон эпифиза – мелатонин [12–18] (рис.1).

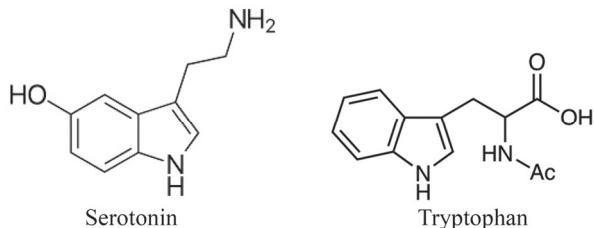


Рис.1. Химическая структура серотонина и триптофана.

Серотонин (5-гидрокситриптамин), нейромедиатор, синтезируемый из триптофана, влияет на ряд поведенческих реакций, таких как настроение, чувство голода, агрессивность, сон и сознание. Было обнаружено, что серотонин оказывает прооксидантное действие, что подтверждается анализами с дезоксирибозой и блеомицином. Кроме того, растет беспокойство, связанное с токсичностью серотонина (СТ), также называемой серотониновым синдромом (СС) – лекарственно-индуцированным проявлением повышенного внутрисинаптического уровня серотонина. Такие психические расстройства, как шизофрения, депрессия и расстройства аутистического спектра, также связаны с серотонинозависимой сигнализацией в ключевые периоды развития нервной системы. Существующие литературные данные указывают на то, что серотонин может влиять на структурно-функциональные свойства ДНК и контролировать ее активность. Однако достоверных данных по непосредственному связыванию этого трансмиттера с последней все еще не полностью выяснены.

Целью данной работы явилось исследование взаимодействия серотонина с ДНК методами флуоресцентной и абсорбционной спектроскопии и определение значения константы K связывания и числа пар оснований n , приходящих на одно место связывания.

2. Материалы и методы

В работе использовались серотонин (Serotonin) (Sigma, США), ДНК тимуса теленка (Calf thymus DNA) (73049-39-5) (Sigma, США), NaCl, Na-citrate (с.ч.). Все препараты использовались без дополнительной очистки. Маточные растворы препаратов приготавливались в SSC (standard saline citrate solution, с ионной силой 0.02 M Na⁺, pH 6.9), содержащий 0.015 M NaCl и 0.0015 M Na-citrate.

Флуоресцентные исследования проводились на спектрофлуориметре Agilent Cary Eclipse Fluorescence Spectrometer (США), абсорбционные исследования – на спектрофотометре UV/VIS spectrophotometers Perkin Elmer Lambda 365 and Cary 60 Agilent, при температурах 25; 30; 34 и 38°C.

Чистота растворов двухцепочечной ДНК проверялась абсорбционным методом при 260 и 280 нм. Соотношение поглощений A₂₆₀/A₂₈₀ равнялось ~1.80, что соответствует стандарту чистоты раствора ДНК. Концентрации препаратов опре-

делялись спектрофотометрически, используя следующие коэффициенты экстинкции: $\epsilon_{260} = 6600$ (моль \times см) $^{-1}$ для ДНК, $\epsilon_{276} = 5500$ (моль \times см) $^{-1}$ для серотонина. Для всех измерений использовались соответствующие кварцевые кюветы с длиной оптического пути 1 см.

При флуоресцентных исследованиях спектры флуоресценции регистрировались в интервале изменения длины волны $280 \leq \lambda \leq 450$ нм, при возбуждении $\lambda_{exit} = 270$ нм. Значения изменений интенсивностей флуоресценции комплексов регистрировались при каждом соотношении вплоть до значений $r = \text{серотонин/ДНК}$, при которых эти изменения становились незначительными.

Флуоресцентный метод является одним из высокочувствительных и наиболее информативных методов и позволяет анализировать исследуемую систему и *in vitro*, и *in vivo* [19]. При этом, для обнаружения взаимодействия между лигандом и макромолекулой более информативно, когда измеряется флуоресценция лиганда в отсутствие и в присутствии макромолекулы. Это дает возможность не только для качественного, но и для количественного анализа комплексов. При этом, в случае ряда лигандов происходит тушение флуоресценции, что не только указывает на образование комплексов, но и позволяет рассчитать константу тушения по методу Штерна–Вольмера и определить параметры связывания лигандов с макромолекулами [20, 21].

При абсорбционных исследованиях спектры поглощения комплексов серотонина с ДНК регистрировались в интервале изменения длины волны $240 \leq \lambda \leq 400$ нм. Для количественного анализа получены спектры поглощения раствора ДНК в отсутствие и в присутствии серотонина при максимуме поглощения серотонина (для которого $\lambda_{max} = 276$ нм). Получены также спектры серотонина в $0.1 \times \text{SSC}$ pH 6.9, с идентичной концентрацией, поскольку в интервале изменения длины волны 240–300 нм имеет место аддитивный эффект поглощения ДНК (для которой $\lambda_{max} = 260$ нм) и серотонина.

По изменениям спектров поглощения и флуоресценции рассчитаны значения r и C_f (координаты Скетчарда), где $r = C_b/C_p$, C_b и C_p концентрации связанных с ДНК молекул трансмиттера и фосфатных групп ДНК соответственно. C_b определяется по уравнению $C_b = C_{total} - C_f$, где C_{total} тотальная концентрация лиганда, C_f – концентрация свободных молекул лиганда в растворе [22].

Для построения изотерм адсорбции по зависимости r/C_f от r и для определения значений K и n , были использованы уравнения [12].

$$r/C_f = K(1 - nr)^{\left[\frac{1-nr}{1-(n-1)r}\right]^{n-1}}, \quad (1)$$

$$r/C_f = K[1 - (2n - 1)r]. \quad (2)$$

3. Результаты и обсуждение

Флуоресцентные спектры серотонина регистрировались в отсутствие и в присутствии различных концентраций ДНК при ионной силе раствора 0.02 М. Полученные спектры представлены на рис.2. Как видно из приведенного рисунка, по мере увеличения концентрации ДНК до соотношения ($r = \text{серотонин/ДНК} = 1/20$), интенсивность флуоресценции серотонина (кривая 1),

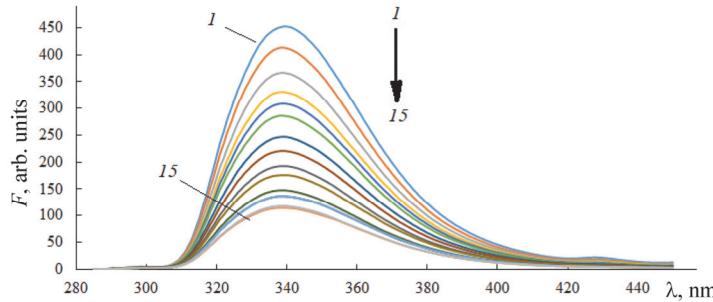


Рис.2. Спектры флуоресценции серотонина (кривая 1) и его комплексов с ДНК (2–15), при температуре 298 К.

уменьшалась, становясь не детектируемой при высоких значениях r (кривые 2–15).

Этот эффект обусловлен тушением флуоресценции связанных с ДНК молекул трансмиттера. Для количественного определения степени, а также механизма тушения, нами получены аналогичные спектры флуоресценции при температурах 298 (1); 303 (2); 307 (3) и 311 (4) К. На основании максимумов интенсивностей флуоресценции комплексов построены кривые зависимости тушения по методу Штерна–Вольмера, по уравнению:

$$\frac{F_0}{F} = 1 + K_{SV}[\text{DNA}], \quad (3)$$

где F_0 и F – интенсивности флуоресценции серотонина в отсутствие и присутствии ДНК, K_{SV} – константа тушения флуоресценции, $[\text{DNA}]$ – концентрация ДНК в растворе. Кривые зависимости F_0/F от концентрации ДНК в растворе приведены на рис.3а.

Из рисунка видно, что эти кривые, по мере возрастания температуры, сдвигаются к оси ординат. Это указывает на то, что имеет место динамическое тушение, причем эти кривые не прямолинейные. Тот факт, что кривые не прямолинейные, свидетельствует о том, что имеет место смешанное тушение. Если допустить существование двух типов связывания серотонина с ДНК, то эти кривые можно разложить на два прямолинейных отрезка. Примечательно, что отрезки кривых с меньшей тангенциальностью различаются друг от друга незначительно, по сравнению с отрезками с большей тангенциальностью. Мы

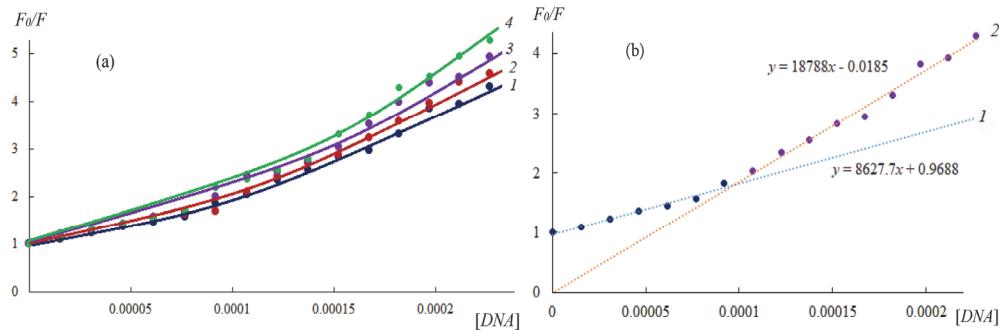


Рис.3. (а) Зависимости F_0/F от $[\text{DNA}]$ комплексов серотонина с ДНК при температурах 298 (1); 303 (2); 307 (3) и 311 (4) К. (б) Зависимость F_0/F от $[\text{DNA}]$ комплексов серотонина с ДНК при температуре 298 К, разложенная на два отрезка. На этих отрезках представлены уравнения, из которых определены значения K_{SV} .

полагаем, что этот факт обусловливается существованием двух типов связывания серотонина с ДНК.

Основываясь на этом, кривая зависимости F_0/F от концентрации ДНК, полученная при 298 К, разложилась на два прямолинейных участка (кривая приведена на рис.3б), из которых определены значения констант тушения для этих типов взаимодействий – $K^1_{\text{sv}} = 9.1 \times 10^3$ и $K^2_{\text{sv}} = 1.9 \times 10^4$ л/моль, соответственно.

Связывание серотонина с ДНК изучалось также методом абсорбционной спектроскопии. Этот метод является относительно простым и, одновременно, информативным, однако, в некоторых случаях применение абсорбционной спектроскопии сталкивается с определенными ограничениями. Такая ситуация возникает, когда лиганд поглощает в той же области длин волн, которая присуща поглощению биомакромолекул, а именно, в интервале $230 \leq \lambda \leq 300$ нм. Таковыми лигандами являются различные производные азотистых оснований или аминокислот, в числе которых, производное триптофана – серотонин (рис.1). Учитывая этот факт, при изучении комплексообразования серотонина с ДНК, для

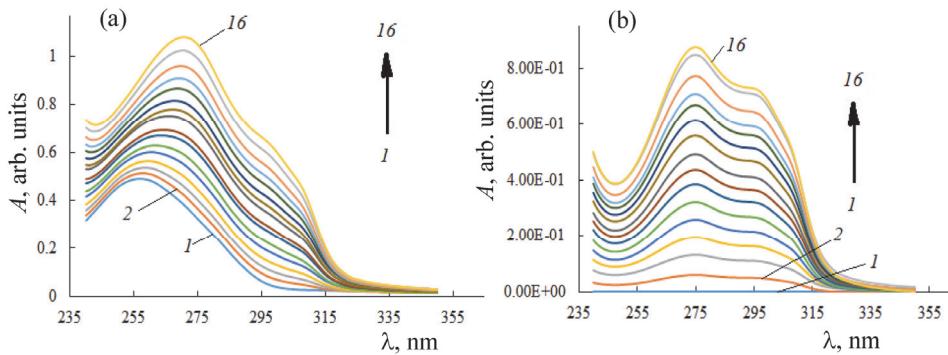


Рис.4. Спектры поглощения A комплексов серотонина (а) с ДНК и (б) без ДНК.

количественного анализа нами получены спектры поглощения серотонина с ДНК (рис.4а) и без ДНК (рис.4б), при тождественных концентрациях трансмиттера.

Из приведенного рисунка видно, что спектры поглощения серотонина при $\lambda = 276$ нм, с учетом вклада поглощения ДНК, возрастают в меньшей степени, чем в его отсутствие (рис. 4б). Этот факт достоверно указывает на связывание этого трансмиттера с ДНК, в результате чего поглощение комплексов серотонин-ДНК не представляет сумму отдельных поглощений реагентов. Следовательно, при $\lambda = 276$ нм, по изменениям спектров поглощения серотонина в присутствии и в отсутствие ДНК можно количественно оценить долю связанных свободных молекул трансмиттера. Применяя этот подход, нами, на основании спектров поглощения, были рассчитаны значения r и C_f , получены кривые связывания (зависимость r/C_f от r) на основании спектров поглощения и флуоресценции, которые приведены на рис.5.

Полученные кривые прямолинейные, что указывает на то, что экспериментально, с помощью указанных методов регистрировался один способ связывания. Однако эти кривые не совпадают друг с другом. Мы полагаем, что этот факт может быть обусловлен тем, что серотонин с ДНК взаимодействует

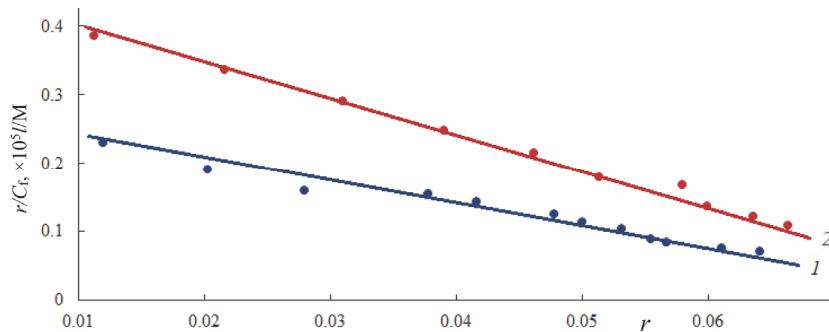


Рис.5. Кривые связывания серотонина с ДНК в координатах Скетчарда, полученные на основании спектров флуоресценции (1) и абсорбции (2), при 25°C.

различными механизмами, один из которых выявляется абсорбционным методом, второй – флуоресцентным.

Не исключается также, что обоими методами выявляется один и тот же механизм взаимодействия, однако существование второго приводит к расхождению этих кривых, влияя на поглощение или флуоресценции связанных молекул трансмиттера. Из этих кривых определены значения константы K связывания и числа пар оснований n , приходящихся на одно место связывания – $K_{\text{abs}} = 4.5 \times 10^5 \text{ M}^{-1}$; $n_{\text{abs}} \approx 6.0$ и $K_{\text{fluor}} = 2.6 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$; $n_{\text{fluor}} \approx 6.0$. Как видно из полученных данных, значения n , оцененные указанными методами, совпадают несмотря на то, что значения K отличаются практически на порядок.

Известно, что низкомолекулярные вещества, в том числе биологически активные соединения, могут связываться с ДНК или РНК (а также с протеинами) необратимо (ковалентно) и обратимо (нековалентно). В последнем случае при взаимодействии с НК выделяются несколько механизмов взаимодействия – интеркаляционный, когда молекулы лиганда, имеющие группу ароматических колец, внедряются в плоскость между основаниями (или пары оснований); неинтеркаляционное связывание в одной из бороздок ДНК (РНК), когда молекулы лиганда локализуются вдоль оси спирали в малом или большом желобке и электростатический. При интеркаляции молекулы лиганда вступают в стекинг взаимодействие с азотистыми основаниями НК, которое в основном за счет $\pi-\pi$ контактов и ван-дер-Ваальсовых сил; желобковое связывание стабилизируются за счет ван-дер-Ваальсовых сил и водородных связей [23].

С этой точки зрения, благодаря наличию фенольной OH-группы и атомов азота в индольном кольце серотонин может образовывать водородные связи с атомами O и N оснований ДНК, что имеет место преимущественно в малом желобке (желобковое связывание). С другой стороны, поскольку индольное кольцо серотонина ароматическое, то не исключаются $\pi-\pi$ взаимодействия с азотистыми основаниями ДНК (полная или частичная интеркаляция).

Примечательно, что спектральные характеристики комплексов серотонина с ДНК совпадают с таковыми, присущими комплексам метиленового синего (МС) с ДНК, по сравнению с другими интеркаляторами (бромистый этидий (БЭ), акридиновый оранжевый (АО)), или с желобково связывающимся соединением Hoechst 33258. Учитывая это, мы полагаем, что одним из способов связывания

этого трансмиттера с ДНК является неполная интеркаляция. Более того, значения K и n , определенные из кривых связывания, также находятся в соответствии с аналогичными значениями, полученными для комплексов МС–ДНК.

Тем не менее, расхождение кривых связывания, полученных на основании анализа спектров флуоресценции и абсорбции может быть обусловлено существованием желобкового типа связывания серотонина с ДНК, что отражается на кривой 2 (рис.5).

4. Заключение

Полученные данные указывают на то, что серотонин может непосредственно связываться с ДНК. На это указывает тот факт, что интенсивность флуоресценции серотонина при увеличении концентрации ДНК в растворе уменьшается. Тушение флуоресценции обычно обуславливается или статическим, или динамическим механизмом. В случае статического механизма тушение происходит в результате образования комплексов между реагентами, которые затем переходят в возбужденное состояние, в то время как в случае динамического тушения реагенты не образуют комплекс в возбужденном состоянии. Этот эффект зависит от температуры, что и обнаружено нами. Отметим, что кривые тушения не прямолинейные, т.е. имеет место смешанное тушение, что указывает на то, что серотонин связывается с ДНК по крайней мере двумя способами. Определены значения констант тушения для двух способов связывания.

Примечательно, что существование двух способов связывания серотонина с ДНК подтверждается также на основании кривых связывания в координатах Скетчарда, которые получены на основании анализа спектров флуоресценции и абсорбции, поскольку эти кривые не совпадают друг с другом. Определенные из этих кривых значения констант связывания различаются примерно на порядок, на основании чего мы заключаем, что серотонин, наряду с флуоресцирующим, образует также не флуоресцирующий (нефлуоресцирующие) комплексы, существование которого (или которых) отражается на тангенциальности кривой связывания, полученной на основании спектров поглощения.

Примечательно также, что изменения спектров поглощения и флуоресценции, а также значения параметров связывания комплексов серотонина с ДНК в большей степени совпадают с таковыми, полученными нами для комплексов МС–ДНК [24, 25]. На основании этого мы заключаем, что превалирующим механизмом связывания этого трансмиттера является частичная интеркаляция, однако нельзя исключить желобковый механизм взаимодействия, как и в случае МС, а также электростатическое связывание.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Комитета по высшему образованию и науке МОНКС РА (Научный грант № 25RG-1F038).

ЛИТЕРАТУРА

1. C.M. Drăgoi, A. Zanfirescu, I.-B. Dumitrescu, A. Ungurianu, D.M. Margină, A.-C. Nicolae. Chemistry, 6, 922 (2024).
2. N. Keswani, A. Panicker, C.S. Kumar. Thermochimica Acta, 697, 178856 (2021).

3. **F.A. Qais, K.M. Abdullah, M.M. Alam, I. Naseem, I. Ahmad.** Int. J. Biol. Macromol., **97**, 92 (2017).
4. **S.B. Kou, K.L. Zhou, Z.Y. Lin, Y.Y. Lou, B.L. Wang, J.H. Shi, Y.X. Liu.** J. Biomol. Struct. Dyn., **40**, 2908 (2022).
5. **Y.J. Luo, B.L. Wang, S.B. Kou, Z.Y. Lin, K.L. Zhou, Y.Y. Lou, J.H. Shi.** J. Biomol. Struct. Dyn., **38**, 4210 (2020).
6. **G. Magdy, F. Belal, A.F.A. Hakiem, A.M. Abdel-Megied.** Int. J. Biol. Macromol., **182**, 1852 (2021).
7. **S.M.V. Almeida, E.A. Lafayette, L.P.B. Gomes da Silva, C.A.C. Amorim, T.B. Oliveira, A.L.T.G. Ruiz, J.E. Carvalho, R.O. Moura, E.I.C. Beltro, M.C.A. Lima.** Int. J. Mol. Sci., **16**, 13023 (2015).
8. **I. Hussain, S. Fatima, S. Siddiqui, S. Ahmed, M. Tabish.** Spectrochim. Acta A. **260**, 119952 (2021).
9. **L. Jin, P. Li, J. Li, H. Yang, X. Pan, H. Li, B. Shen.** J. Mol. Liq., **341**, 117357 (2021).
10. **Y.F. Liu, B.X. Zhang, X.M. Chen, Z.A. Guo, Y. Wang, J.C. Zhao.** J. Chin. Chem. Soc., **66**, 1381 (2019).
11. **E.A. Lafayette, S.M.V. de Almeida, R.V. Cavalcanti Santos, J.F. de Oliveira, C.A.D.C. Amorim, R.M.F. da Silva, M.G.D.R. Pitta, I.D.R. Pitta, R.O. de Moura, L.B. de Carvalho Júnior.** Eur. J. Med. Chem., **136**, 511 (2017).
12. **N.K. Kaushik, N. Kaushik, P. Attri, N. Kumar, C.H. Kim, A.K. Verma, E.H. Choi.** Molecules, **18**, 6620 (2013).
13. **C.M. Dragoi, E. Morosan, I.B. Dumitrescu, A.C. Nicolae, A.L. Arsene, D. Draganescu, L. Dumitru, I. Ana, P.S. Anca, N. Camelia.** Farmacia, **67**, 557 (2019).
14. **J. Moncrieff, R.E. Cooper, T. Stockmann, S. Amendola, M.P. Hengartner, M.A. Horowitz.** Mol. Psychiatry, **28**, 3243 (2022).
15. **S.M. Mir, A. Aliarab, G. Goodarzi, M. Shirzad, S.M. Jafari, D. Qujeq, S.S. Tehrani, J. Asadi.** Cell Biochem. Funct., **40**, 4 (2022).
16. **S. Klaessens, V. Stroobant, E. De Plaen, B.J. Van den Eynde.** Front. Mol. Biosci., **9**, 897929 (2022).
17. **D.E. Blask, S.M. Hill, R.T. Dauchy, S. Xiang, L. Yuan, T. Duplessis, L. Mao, E. Dauchy, L.A. Sauer.** J. Pineal Res., **51**, 259 (2011).
18. **N. Rehmani, M. Farhan, S.M. Hadi.** J. Mol. Genet. Med., **10**(3), 223 (2016).
19. **J.R. Lakowicz.** Principles of Fluorescence Spectroscopy, University of Maryland, Maryland, (2006).
20. **P. Paul, S.S. Matib, G.S. Kumar.** J Photochem Photobiol B, **204**, 111804 (2020).
21. **M. Hossain, A. Kabir, G.S. Kumar.** Dyes and Pigments, **92**, 1376 (2012).
22. **P.O. Vardevanyan, A.P. Antonyan, M.A. Parsadanyan, M.A. Shahinyan, V.G. Sahakyan.** J. Biomol. Struct. and Dyn., **36**, 3607 (2017).
23. **K. Miskovic, M. Bujak, M.L. Baus, L. Glavas-Obrovac.** Hig Rada Toxicol., **64**, 593 (2013).
24. **A.P. Antonyan, Z.O. Movsisyan, A.H., Karapetyan, P.O. Vardevanyan.** Proceedings

of the YSU B: Chemical and Biological Science, **57**, 214 (2023).
25. **M. Hossain, K.G. Suresh.** Mol. Biosyst., **11**, 1311 (2009).

ԴՆԹ-Ի ՀԵՏ ՆՅԱՐԴԱՀԱՐՈՐԴԻՉ ՍԵՐՈՏՈՆԻՆԻ
ՓՈԽԱԶԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ՄԵԽԱՆԻԶՄՆԵՐԻ ՎԵՐԱԲԵՐՅԱԼ

Մ.Ա. ՓԱՐՍԱԴԱՆՅԱՆ, Ա.Պ. ԱՆՏՈՆՅԱՆ, Մ.Ա. ՇԱՀԻՆՅԱՆ, Ա.Վ. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ,
Գ.Հ. ՔՈՉԱՐՅԱՆ, Մ.Ն. ՂԱՐԻԲՅԱՆ, Պ.Օ. ՎԱՐԴԵՎԱՆՅԱՆ

ԴՆԹ-ի հետ սերոտոնինի փոխազդեցությունն ուսումնասիրվել է ֆլուորեսցենտային և կլանման սպեկտրոսկոպիայի մեթոդներով: Ցույց է տրվել, որ սերոտոնինի ֆլուորեսցենցիայի ինտենսիվությունը նվազում է (մարում է) լուծույթում ԴՆԹ-ի աճող կոնցենտրացիաների դեպքում: Ինտենսիվությունների չափումների հիման վրա որոշվել են մարման հաստատունի արժեքները (Շտերն-Վոլմերի հաստատունը) – K_{SV} -ն շերմաստիճանային փոփոխության 298–311 Կ միջակայքում: Ցույց է տրվել նաև, որ սերոտոնինի աճող կոնցենտրացիաների դեպքում կլանման սպեկտներն ավելի մեծ չափով աճում են ԴՆԹ-ի բացակայության դեպքում, համեմատած նրա առկայության հետ: ԴՆԹ-ի հետ սերոտոնինի կոմպլեքսների ֆլուորեսցենտային և կլանման սպեկտրների հիման վրա ստացվել են կապման կորերը և որոշվել են կապման հաստատունի (K) և մեկ կապման տեղին բաժին ընկնող գույզ հիմքերի թվի (n) արժեքները:

TO THE MECHANISMS OF INTERACTION OF THE NEUROTRANSMITTER SEROTONIN WITH DNA

M.A. PARSADANYAN, A.P. ANTONYAN, M.A. SHAHINYAN, A.V. VARDANYAN,
G.H. KOCHARYAN, M.N. GHARIBYAN, P.O. VARDEVANYAN

Interaction of serotonin with DNA has been studied by methods of fluorescence and absorption spectroscopies. Serotonin fluorescence intensity was shown to decrease (quench) at the increasing concentrations of DNA in the solution. Based on the intensity measurements the values of the quenching constants (Stern– Volmer constant) – K_{SV} were determined in the temperature interval 298–311 K. It was also shown that the absorption spectra at the serotonin increasing concentrations increase to a higher degree in the absence of DNA, as compared to the presence of DNA. Based on the fluorescence and absorption spectra of the serotonin complexes with DNA, the adsorption isotherms were obtained and the values of the binding constant K and number of base pairs per binding site n were determined.

NONLINEAR INTERACTION OF HERMITE–COSH GAUSSIAN LASER BEAM IN COLD COLLISIONLESS PLASMA

K. WALIA*, K. SINGH, T. SINGH

Department of Physics, DAV University Jalandhar, India

*e-mail: keshavwalia86@gmail.com

(Поступила в редакцию 20 октября 2025 г.)

The present problem investigates nonlinear interaction of Hermite–Cosh Gaussian (HChG) beam in cold collisionless plasma. The ponderomotive force results in carriers redistribution away from beam's axis thereby leading to generation of gradients of intensity inside plasma. These gradients of intensity cause self-focusing of beam. The beam's field vector wave equation in cold collisionless plasma is solved with established paraxial theory to obtain 2nd order ODE for beam waist of beam. Since, analytical solution of this equation is not possible. So, this is numerically solved using Runge–Kutta 4th order method for examining response of beam waist against dimensionless distance. We have also examined effect of notable parameters of laser and plasma including plasma density, plasma temperature, beam intensity, decentered parameter and beam radius on response of beam waist of beam.

ЛИТЕРАТУРА

1. Wilks, S.C., Dawson, J.M., Mori, W.B., Katsouleas, T., and Jones, M.E., *Phys. Rev. Lett.*, 1989, vol. 62, p. 2600.
2. Corkum, P.B., Rolland, C., and Rao, T., *Phys. Rev. Lett.*, 1986, vol. 57, p. 2268.
3. Sprangle, P., Esarey, E., and Krall, J., *Phys. Plasmas*, 1996, vol. 3, p. 2183.
4. Faure, J., Glinec, Y., Pukhov, A., Kiselev, S., Gordienko, S., Lefebvre, E., Rousseau, J.P., Burgy, F., and Malka, V., *Nature*, 2004, vol. 431, p. 541.
5. Walia, K., *Optik*, 2021, vol. 225, p. 165592.
6. Walia, K., Sharma, P., and Singh, A., *Optik*, 2021, vol. 245, p. 167627.
7. Walia, K. and Singh, A., *Optik*, 2021, vol. 247, p. 167867.
8. Lemoff, B.E., Yin, G.Y., GordonIII, C.L., Barty, C.P.J., and Harris, S.E., *Phys. Rev. Lett.*, 1995, vol. 74, p. 1574.
9. Walia, K., *Commun. Theor. Phys.*, 2023, vol. 75, p. 095501.
10. Walia, K. and Tripathy, A., *J. Appl. Spectrosc.*, 2025, vol. 92, p. 335.
11. Mahmoud, S.T. and Sharma, R.P., *Phys. Plasmas* 2001, vol. 8, p. 3419.
12. Yu, W., Yu, M.Y., Xu, H., Tian, Y.W., Chen, J., and Wong, A.Y., *Laser Part. Beams*, 2007, vol. 25, p. 631.
13. Milchberg, H.M., Durfee III, C.G., and McIlrath, T.J., *Phys. Rev. Lett.*, 1995, vol. 75, p. 2494.
14. Tobey, R.I., Siemens, M.E., Cohen, O., Murnane, M.M., Kapteyn, H.C., and Nelson, K.A., *Opt. Lett.*, 2007, vol. 87, p. 286.

15. Hora, H., *Laser Interaction and Related Plasma Phenomena*, vol.4B, Plenum: New York, 1977.
16. Kane, E.L. and Hora, H., *Laser Interaction and Related Plasma Phenomena*, Plenum, New York, 1977.
17. Sodha, M.S. and Tripathi, V.K., *J. Appl. Phys.*, 1977, vol. 48, p. 1078.
18. Sodha, M.S., Mittal, R.S., Kumar, S., and Tripathi, V.K., *Opto-electronics*, 1974, vol. 6, p. 167.
19. Akhmanov, S.A., Sukhorukov, A., and Khokhlov, R., *Sov. Phys. Uspekhi.*, 1968, vol. 10, p. 609.
20. Sodha, M.S., Ghatak, A.K., and Tripathi, V.K., *Progress in Optics*, North Holland; Amsterdam, 1976.
21. Hora, H., *Zeitschrift fur Physik*, 1969, vol. 226, p. 159.
22. Hora; H., Badziak, J., Read, M.N., et al., *Phys. Plasmas*, 14, 072701 (2007).
23. Lalousis, P., Moustazis, S., Hora, H., and Miley, G.H., *J. Fusion Energ.*, 2015, vol. 34, p. 62.
24. Hora, H., *J. Opt. Soc. Am.*, 1975, vol. 65, p. 882.
25. Wang, Y. and Zhou, Z., *Phys. Plasmas*, 2011, vol. 18, p. 043101.

**Ab INITIO STUDY OF STRUCTURAL, ELECTRONIC, OPTICAL,
AND ELASTIC PROPERTIES OF YN_xBi_{1-x} AND YAs_xBi_{1-x}
ALLOYS FOR INFRARED AND VISIBLE
OPTOELECTRONIC APPLICATIONS**

I. BENDJEDIDE¹, S. TOUAM^{1,2*}, T. FOUGHALI¹, A. BENMACHICHE³,
M.GACEM¹, N. MOUNIS⁴, I. CHAREF¹, H. MERADJI²,
S. GHEMID², S. CHELLI², A. DOUARA⁵

¹*Physico-Chemistry of Materials Laboratory (LPCM), Department of Physics, Faculty of
Science and Technology, Chadli Bendjedid University (UCBET), El Tarf 36000, Algeria*

²*Radiation Physics Laboratory (LPR), Department of Physics, Faculty of Sciences,
Badji Mokhtar University, Annaba 23000, Algeria*

³*Computer Science and Applied Mathematics (LIMA) Laboratory, Computer Science
Department, Faculty of Science and Technology, ChadliBendjedid University,
(UCBET), El Tarf, Algeria, PB 73, 36000*

⁴*Department of Physics, Faculty of Exact Sciences, Sidi Bel Abbés University, Algeria*

⁵*Faculty of science and technology, Tissemstuniversity, Tissemstilt, 38000 Algeria*

*e-mail: touam-selma@univ-eltarf.d

(Поступила в редакцию 14 августа 2025 г.)

This paper presents a pioneering first-principles investigation into the structural, elastic, electronic, and optical properties of novel ternary alloys YN_xBi_{1-x} and YAs_xBi_{1-x} which are considered promising candidates for advanced photonic and electronic applications. We employed the full-potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method, based on density functional theory (DFT), as implemented in the WIEN2K simulation code, for compounds crystallizing in the NaCl-type structure. Structural properties, including lattice constants, bulk modulus and elastic properties, such as elastic constants, shear modulus, anisotropy factor, Poisson's ratio, Young's modulus, and the Kleinman parameter were calculated using the generalized gradient approximation (GGA) for the exchange-correlation (XC) potential. Furthermore, the Wu-Cohen generalized gradient approximation (WC-GGA) and the modified Becke and Johnson (mBJ) approaches were applied to examine electronic (band structure) and optical (real and imaginary parts of the dielectric function, refractive index) properties, respectively. These findings highlight the significant potential of these materials for use in advanced optoelectronic technologies, opening new avenues for future innovation.

ЛИТЕРАТУРА

1. Liang, D. and Bowers, J.E., *Prog. Quantum. Electron.*, 2021, vol. 78, p. 100362.
2. Tickner, B.J., Stasiuk, G.J., Duckett, S.B., and Angelovski, G., *Chem. Soc. Rev.*, 2020, vol. 49, no. 17, p. 6169.
3. Rowberg, A.J.E., Mu, S., Swift, M.W., and Van de Walle C.G., *Phys. Rev. Mater.*, 2021, vol. 5, no. 9, p. 094602.

4. Touam, S., Belghit, R., Mahdjoubi, R., Megdoud, Y., Meradji, H., Khan, Ahmed, R, Khenata, R., Ghemid, S., Rai, D.P., and Al-Douri, Y., *Bull. Mater. Sci.*, 2020, vol. 43, no. 1, p. 22.
5. Charef, I., Touam, S., Boumaza, A., Mounis, N., Khelifati, F.Z., Gacem, M., Bendjedide, I., Meradji, H., and Ghemid, S., *Phys. Solid State*, 2025, vol. 67, no. 3, p. 181.
6. Winiarski, M.J., *Materials*, 2020, vol. 13, no. 21, p. 4997.
7. Kadr, A., Sediki, H., Hiadsi, S., and Elchikh, M., *Rev. Mex. Fís.*, 2024, vol. 70, no. 6, p. 060502.
8. Narimani, M. and Nourbakhsh, Z.J., *Phys. Chem. Solids*, 2020, vol. 145, p. 109537.
9. Louafi, A., Chaouche, Y., and El Hassasna, A., *Appl. Phys. A*, 2021, vol. 127, no. 7, 506.
10. Gacem, M., Touam, S., Guenfoud, F., Mounis, N., Benmachiche, A., Bendjedide, I., Charef, I., Ghemid, S., and Meradji, H., *Phys. Solid State*, 2025, vol. 67, no. 4 p. 273
11. Sharma, N.N., Chandra, D., Amit, A., and Singh, R. A.K., *Mater. Sci. Semicond. Process*, 2022, vol. 107, p. 107033.
12. Abukhadra, M.R., Ibrahim, S.A., and El-Maghribi, H.H., *Braz J Phys*, 2024, vol. 54, no. 1, p. 159.
13. Abedi, S., Ahmadpour, M.T., Baninajarian, S., Kahnouji, H., Hashemifar, S.J., and Levchenko, S.V., *arXiv preprint*, 2022, vol. 2211(14644), 01.
14. Patra, A., Patra, B., and Samal, P., *Phys ChemChem Phys*, 2022, vol. 24, no. 1, p. 13633.
15. Macias-Pinilla, D.F. and Giannici, F., *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2025, vol. 17, n. 14, p. 20501.
16. Rahman, M.A., Mousumi, K., Ali, M.L., Khatun, R., Rahman, M.Z., Hasan, S.S., Hasan, W., Rasheduzzaman, M., and Hasan, M.Z., *Results Phys*, 2023, vol. 44, p. 106141.
17. Rahman, N., Husain, M., Tirth, V., Alqahtani, A., Alqahtani, H., Al-Mughanam, T., Al-ghtani, A.H., Khan, R., Sohail, M., Khan, A.A., Azzouz-Rached, A., and Khan, A., *RSC Adv*, 2023, vol. 13, p. 18934.
18. Hossain, A., Mahtab, S.S., Shahiduzzaman, M., Alharbi, H.F., and Uddin, M.M., *AIP Adv*, 2025, vol. 15, p. 105319.
19. Hedhili, F., Khan, H., Ullah, F., Sohail, M., Khan, R., Alsalmi, O.H., Alrobei, H., Abualnaja, K.M., Alosaimi, G., and Albaqawi, H.S., *Molecules*, 2024, vol. 29, no. 5, 961.
20. Bouhmaidi, S., Marjaoui, A., Talbi, A., Zanouni, M., Nouneh, K., and Setti, L., *Comput. Condens. Matter*, 2022, vol. 31, p. e00663.
21. Hadjab, M., Ziane, M.-I., HadjLarbi, A., Bennacer, H., Faraji, M., and Guskova, O., *Eur. Phys. J. B*, 2024, vol. 97, p. 85.
22. Amamoto, G. and Sakuda, Y., *J. Appl. Phys*, 2024, vol. 135, p. 205109.
23. Touam, S., Mounis, N., Boumaza, A., Ghemid, S., Meradji, H., Khenata, R., Bin Omran, S., Badi, N., and Kushwaha, A.K., *J. Mol. Model*, 2022, vol. 28, no. 7, p. 182.
24. Mansur, M.B., Akter, T., Ovi, I.A., Islam, J., and Sajal, W.R., *RSC Adv*, 2025, vol. 15, p. 4874.
25. Boucetta, S. and Benbahouche, L., *J. Mater. Sci.: Mater. Eng.*, 2025, vol. 20, p. 3.
26. Hu, W., Pan, M., Huang, Z., Yang, H., Wu, H., Pan, L., Cao, Z., and Zhao, Y., *Front. Mater*, 2021, vol. 8, p. 651435.
27. Ponomareva, A.V., *Phys. Solid State*, 2023, vol. 65, no. 1, p. 1.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

<p>Ա.Ա. Գրիգորյան. $^{68}\text{Za}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$ ռեակցիայով արտադրվող գալիում-68 բժշկական իզոտոպի ակտիվության տեսական գնահատական</p> <p>Ռ.Ն. Բալասանյան, Գ.Ռ. Բադայան, Ի.Գ. Գրիգորյան, Պ.Հ. Սոիժիկյան, Ռ.Բ. Կոստանյան. Էլեկտրական դաշտի ազդեցությունը այումինե թիթեղի գրաֆիտային ծածկույթի վրա.....</p> <p>Ռ. Սահակյան, Ռ. Սարգսյան, Է. Պողոսյան, Կ. Արզումանյան, Հ. Համբարձումյան, Է. Գագագյան. Քվանտային վիճակների կառավարման համար լազերային դաշտերի ավտոմատացված օպտիմալացում</p> <p>Լ.Ս. Ասլամյան, Ռ.Բ. Ալավերդյան, Ա.Հ. Մակարյան, Ռ.Ս. Հակոբյան. Հոմեոտրոպ սահմանային պայմաններով խոլեստերիկ կառուցվածքի օպտիկական հատկությունները.....</p> <p>Ա. Տոնյան, Ա. Պապյան, Ա. Գողյան. Օպտիկական մագնիտումետրիա մարդաչափ Հելմիոլցի կծիկներում առաջացվող արտածին մագնիսական դաշտերի համար</p> <p>Գ.Յ. Խոտանյան. Li⁺ իոններով լեզիրված Tm₃Al₅O₁₂ նոնաքարերի աճեցում և հետազոտում</p> <p>Ա. Վարդանյան, Ա. Ասատրյան, Ա. Երանոսյան, Ա. Ստեփանյան, Գ. Խաչատրյան, Ա. Հայրապետյան, Յ.-Հ. Xie. Խաչբայի սպին-ուղեծրային փոխազդեցության ներգրծությունը էլեկտրոնների շարժունության վրա GaN նանոլարերում ձայնային ֆոնոնների վրա ցրման դեպքում</p> <p>Ա.Ե. Մարտիրոսյան, Պ.Հ. Մուժիկյան, Վ.Ա. Մարտիրոսյան, Ռ.Բ. Կոստանյան. Սելցիավոր սարք դիտարկման գերմեծ տիրութով՝ մարդկանց հայտնաբերման և տեղայնացման համար.....</p> <p>Ա.Ն. Ավագյան, Ս.Ս. Յայլյան, Վ.Ա. Մարգարյան, Գ.Ս. Կարախանյան, Տ.Ս. Ազատյան, Ս.Ս. Մականյան, Ա.Վ. Կոստանյան. Սինթետիկ աղամանների առաջացման և աճի ակուստիկ խթանումը դրանց շերմադինամիկական կայունության ոլորտում.....</p> <p>Ա.Ա. Կուզանյան, Ա.Ս. Կուզանյան, Լ.Գ. Մհերյան, Վ.Ռ. Նիկողոսյան. Հեղուկ հելիումի եռման ջերմաստիճանում աշխատող ջերմուկէլեկտրական տվյալ էքստրամալ ուլտրամանուշակագրություն տիրութում միակի ֆուտոնների գրանցման համար.....</p> <p>Ա.Ա. Մարգարյան, Տ.Ս. Ազատյան, Ե.Մ. Ալեքսանյան, Ն.Բ. Կնյազյան, Տ.Վ. Գրիգորյան, Ա.Ա. Ղազարյան, Ա.Ա. Պետրոսյան, Վ.Վ. Հարությունյան, Ա.Օ. Բադայան, Ս.Ս. Պիրումով, Վ.Վ. Բաղրամյան. Սիկրոպալիքային մեթոդով ստացված կադմիումի մետասիլիկատի ֆուտոկատալիտիկ և ռադիացիոն-օպտիկական հատկությունները</p> <p>Է.Ռ. Առաքելովա, Ս.Լ. Գրիգորյան, Ա.Ա. Միրզոյան, Ա.Բ. Միրզոյան, Լ.Մ. Մաշենկո, Ա.Ս. Խաչատրյան, Մ.Մ. Երանոսյան, Վ.Վ. Բաղրամյան. Zn/Ag/Fe/Cu թիրախների կառուցվածքային նախագծում և <i>p</i>-տիպի</p>	<p>463</p> <p>470</p> <p>477</p> <p>486</p> <p>496</p> <p>505</p> <p>513</p> <p>520</p> <p>528</p> <p>541</p> <p>549</p>
--	--

հաղորդունակությամբ $ZnO/Ag/Fe/Cu$ բարակ թաղանթների ձևավորում DC-մագնետրոնային մեթոդով սենյակային ջերմաստիճանում	559
Մ.Ա. Եվինյան, Հ.Ա. Հարությունյան, Ա.Հ. Դավթյան, Ս.Դ. Արսենյոս. Էթոքսիլային ռադիկալի և դրա կոնֆորմերների պոտենցիալ էներգիայի մակերևույթի քվանտարիմիական ուսումնասիրություն	572
Վ.Պ. Քալանթարյան, Ռ.Ա. Ղազարյան, Ն.Հ. Կարապետյան, Գ.Վ. Անանյան, Մ.Լ. Մովսիսյան, Յու.Ա. Բարյան. Ոչ ջերմային միլիմետրային էլեկտրամագնիսական ալիքների ազդեցության ուսումնասիրությունը ջրի և ԴՆԹ-ի ջրային լուծույթների ֆիզիկական հատկությունների վրա....	580
Մ.Ա. Փարադանյան, Ա.Պ. Անտոնյան, Մ.Ա. Շահինըան, Ա.Վ. Վարդանյան, Գ.Հ. Քոչորյան, Մ.Ն. Ղարիբյան, Հ. Վարդելանյան. ԴՆԹ-ի հետ նյարդահաղորդիչ սերոտոնինի փոխազդեցության մեխանիզմների վերաբերյալ.....	590
K. Walia, K. Singh, T. Singh. Nonlinear Interaction of Hermite–Cosh Gaussian Laser Beam in Cold Collisionless Plasma.....	599
I. Bendjedide, S. Touam, T. Foughali, A. Benmachiche, M. Gacem, N. Mounis, I. Charef, H. Meradji, S. Ghemid, S. Chell, A. Douara. Ab Initio Study of Structural, Electronic, Optical, and Elastic Properties of YN_xBi_{1-x} and YAs_xBi_{1-x} Alloys for Infrared and Visible Optoelectronic Applications.....	601

CONTENTS

A.A. Grigoryan. Theoretical Estimation of the Activity of the Medical Isotope Gallium-68 Produced by the Reaction $^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$	463
R.N. Balasanyan, G.R. Badalyan, I.G. Grigoryan, P.H. Muzhikyan, R.B. Kostanyan. Effect of Electric Fields on Graphite Coatings of Aluminum Foil	470
R. Sahakyan, R. Sargsyan, E. Pogosyan, K. Arzumanyan, H. Hambardzumyan, E. Gazazyan. Automated Optimization of Laser Fields for Quantum State Manipulation	477
L.S. Aslanyan, R.B. Alaverdyan, A.H. Makaryan, R.S. Hakobyan. Self-Focusing of Optical Properties of Cholesteric Structure with Homeotropic Boundary Conditions.....	486
A.Y. Tonoyan, A.V. Papoyan, A.L. Gogyan. Optical Magnetometry of Induced Extrinsic Magnetic Fields in Human-Sized Helmholtz Coils	496
G.Ts. Kharatyan. Growth and Investigation of $\text{Tm}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ Garnet Doped with Li^+ Ions.....	505
A. Vartanian, A. Asatryan, M. Yeranosyan, A. Stepanyan, G. Khachatryan, S. Hayrapetyan, Y.-H. Xie. Impact of Rashba Spin-Orbit Interaction on Electron Mobility in GaN Nanowires due to Scattering by Acoustic Phonons..	513
A.E. Martirosyan, P.H. Muzhikyan, V.A. Martirosyan, R.B. Kostanyan. Sectional Device with an Ultra-Large Coverage Area for Human Detection and Localization.....	520
A.N. Avagyan, S.M. Yayloyan, K.A. Sargsyan, G.S. Karakhanyan, T.S. Azatyan, M.S. Sakanyan, A.K. Kostanyan. Acoustic Stimulation of the Nucleation and Growth of Synthetic Diamonds within their Thermodynamic Stability Field	528
A.A. Kuzanyan, A.S. Kuzanyan, L.G. Mheryan, V.R. Nikoghosyan. Thermoelectric Sensor for Registration of Single Photons in the Extreme Ultraviolet Region, Operating at the Boiling Point of Liquid Helium	541
A.A. Sargsyan, T.S. Azatyan, E.M. Aleksanyan, N.B. Knyazyan, T.V. Grigoryan, A.A. Kazaryan, A.A. Petrosyan, V.V. Harutyunyan, A.O. Badalyan, S.S. Pirumov, V.V. Baghramyan. Photocatalytic and Radiation-Optical Properties of Cadmium Metasilicate Synthesized by the Microwave Method	549
E.R. Arakelova, S.L. Grigoryan, A.A. Mirzoian, A.B. Mirzoian, L.M. Savchenko, A.M. Khachatryan, M.S. Yeranosyan. Structural Design Of	

Zn/Ag/Fe/Cu Targets And Formation Of ZnO/Ag/Fe/Cu Thin Films Of <i>p</i> -Type Conductivity By The DC-Magnetron Method At Room Temperature	559
M.A. Evinyan, H.A. Harutyunyan, A.H. Davtyan, S.D. Arsentev. Quantum-Chemical Study of the Potential Energy Surface of the Ethoxyl Radical and its Conformers.....	572
V.P. Kalantaryan, R.S. Ghazaryan, N.H. Karapetyan, G.V. Ananyan, M.L. Movsisyan, Yu.S. Babayan. Physical Properties of Water and Aqueous DNA Solutions under the Influence of Non-Thermal Electromagnetic Waves of the Millimeter Range	580
M.A. Parsadanyan, A.P. Antonyan, M.A. Shahinyan, A.V. Vardanyan, G.H. Kocharyan, M.N. Gharibyan, P.O. Vardevanyan. To the Mechanisms of Interaction of the Neurotransmitter Serotonin with DNA.....	590
K. Walia, K. Singh, T. Singh. Nonlinear Interaction of Hermite–Cosh Gaussian Laser Beam in Cold Collisionless Plasma.....	599
I. Bendjedide, S. Touam, T. Foughali, A. Benmachiche, M.Gacem, N. Mounis, I. Charef, H. Meradji, S. Ghemid, S. Chell, A. Douara. Ab Initio Study of Structural, Electronic, Optical, and Elastic Properties of YN_xBi_{1-x} and YAs_xBi_{1-x} Alloys for Infrared and Visible Optoelectronic Applications	601

СОДЕРЖАНИЕ

А.А. Григорян. Теоретическая оценка активности медицинского изотопа галлий-68, получаемого посредством реакции $^{68}\text{Zn}(\text{p},\text{n})^{68}\text{Ga}$	463
Р.Н. Баласанян, Г.Р. Бадалян, И.Г. Григорян, П.Г. Мужикян, Р.Б. Костанян. Влияние электрического поля на графитовое покрытие алюминиевой фольги	470
Р. Саакян, Р. Саргсян, Э. Погосян, К. Арзуманян, А. Амбарцумян, Э.А. Газазян. Автоматическая оптимизация лазерных полей для манипулирования квантовыми состояниями.....	477
Л.С. Асланян, Р.Б. Алавердян, А.А. Макарян, Р.С. Акопян. Оптические свойства холестерической структуры с гомеотропными граничными условиями	486
А. Тоноян, А. Папоян, А. Гогян. Оптическая магнитометрия индуцированных внешних магнитных полей в катушках Гельмгольца размером с человека.....	496
Г.Ц. Харатян. Выращивание и исследование легированного ионами Li^+ граната $\text{Tm}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$	505
А. Вартанян, А. Асатрян, М. Ераносян, А. Степанян, Г. Хачатрян, С. Айрапетян, Y.-H. Xie. Влияние спин-орбитального взаимодействия Рашбы на подвижность электронов в нанопроволоках GaN при рассеянии на акустических фононах	513
А.Е. Мартиросян, П.Г. Мужикян, В.А. Мартиросян, Р.Б. Костанян. Секционированное устройство со сверхбольшой зоной наблюдения для обнаружения и определения местоположения людей	520
А.Н. Авагян, С.М. Яйлоян, К.А. Саргсян, Г.С. Карабанян, Т.С. Азатян, М.С. Саканян, А.К. Костанян. Акустостимуляция образования и роста синтетических алмазов в области их термодинамической стабильности..	528
А.А. Кузанян, А.С. Кузанян, Л.Г. Мгерян, В.Р. Никогосян. Термоэлектрический сенсор для регистрации одиночных фотонов в области экстремального ультрафиолета, работающий при температуре кипения жидкого гелия.....	541
А.А. Саргсян, Т.С. Азатян, Е.М. Алексанян, Н.Б. Князян, Т.В. Григорян, А.А. Казарян, А.А. Петросян, В.В. Арутюнян, А.О. Бадалян, С.С. Пирумов, В.В. Баграмян. Фотокаталитические и радиационно-оптические свойства метасиликата кадмия, полученного микроволновым методом	549
Э.Р. Аракелова, С.Л. Григорян, А.А. Мирзоян, А.Б. Мирзоян, Л.М. Савченко, А.М. Хачатрян, М.С. Ераносян. Структурное конструирование мишеней $\text{Zn}/\text{Ag}/\text{Fe}/\text{Cu}$ и формирование тонких пленок	

ZnO/Ag/Fe/Cu <i>p</i> -типа проводимости DC-магнетронным методом при комнатной температуре	559
М.А. Эвинян, А.А. Арутюнян, А.Г. Давтян, С.Д. Арсентьев. Квантово-химическое исследование поверхности потенциальной энергии этоксильного радикала и его конформеров	572
В.П. Калантарян, Р.С. Казарян, Н.Г. Карапетян, Г.В. Ананян, М.Л. Мовсисян, Ю.С. Бабаян. Физические свойства воды и водных растворов ДНК под воздействием нетепловых электромагнитных волн миллиметрового диапазона	580
М.А. Парсаданян, А.П. Антонян, М.А. Шагинян, А.В. Варданян, Г.Г. Кочарян, М.Н. Гарибян, П.О. Варdevanян. К механизмам взаимодействия нейротрансмиттера серотонина с ДНК	590
K. Walia, K. Singh, T. Singh. Nonlinear Interaction of Hermite–Cosh Gaussian Laser Beam in Cold Collisionless Plasma.....	599
I. Bendjedide, S. Touam, T. Foughali, A. Benmachiche, M. Gacem, N. Mounis, I. Charef, H. Meradji, S. Ghemid, S. Chell, A. Douara. Ab Initio Study of Structural, Electronic, Optical, and Elastic Properties of YN_xBi_{1-x} and YAs_xBi_{1-x} Alloys for Infrared and Visible Optoelectronic Applications	601