

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Секция Электродинамики сложных систем и нанофотоники
в рамках 68-й Всероссийской научной конференции МФТИ
1 апреля 2026, ИТПЭ РАН, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, с.6, к. 306

Управление спиновой динамикой в ферритмагнетике с точкой компенсации намагниченности

***Г.Ю. Левкин^{1,2}, Д.О. Игнатьева^{1,2}, Н.А. Гусев^{1,2}, Д.М. Кричевский^{1,2}, А.К. Звездин^{1,2,3}, С.Н. Полулях⁴,
В.И. Белотелов^{1,2}***

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

²Российский квантовый центр

³Институт общей физики имени А.М. Прохорова Российской академии наук

⁴Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского

В работе продемонстрирована возможность управления частотами мод спиновой динамики в феррите-гранате вблизи температуры компенсации намагниченности при нормально приложенном магнитном поле за счет варьирования температуры и величины поля. Проведено численное моделирование динамики вектора Нееля и предложен механизм управления его прецессией с помощью двух фемтосекундных импульсов.

Условия формирования динамических спиральных доменов в тонких магнитных пленках ферритов-гранатов с перпендикулярной анизотропией

Н. А. Янушкевич, Д. С. Мехоношин, Л. А. Памятных

Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина

Доменные структуры тонких магнитных плёнок во многом определяют их магнитные свойства и возможность их применения в существующих и перспективных устройствах хранения и обработки информации. Контролируемое создание доменных конфигураций с заданными параметрами является важным этапом разработки новых типов таких устройств. На примере эпитаксиальных плёнок ферритов-гранатов известно [1] явление возникновения устойчивых динамических доменных структур (ДДС) в виде спиральных и кольцевых магнитных доменов в исходно неупорядоченной лабиринтной доменной структуре под действием переменных магнитных полей. В работе [2] формирование спиральных доменов (СД) в однородном гармоническом поле было воспроизведено методом численного моделирования в рамках подхода Гинзбурга-Ландау, что позволяет изучать закономерности образования устойчивых ДДС не только в плёнках ферритов-гранатов, но в более широком классе плёнок с одноосной перпендикулярной магнитной анизотропией.

Доменная структура тонкой магнитной плёнки описывается скалярным параметром порядка $\phi(\mathbf{r}, t)$, который принимает непрерывный спектр значений в диапазоне $[-1, +1]$. Свободная энергия имеет вид

$$F[\phi] = \int d^2r \left\{ k \left(-\frac{\phi^2}{2} + \frac{\phi^4}{4} \right) + a(\nabla\phi)^2 - h(t)\phi + \frac{1}{4\pi} \int d^2\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}') \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{1}{\sqrt{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 + 1}} \right) \right\},$$

где k — эффективный параметр одноосной анизотропии, a — эффективный обменный параметр, $h(t)$ — переменное поле. Уравнение динамики имеет вид [3, 2]:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = (1 - \phi^2) \left(k\phi + h(t) - \frac{1}{2\pi} \int d^2\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r}') \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{1}{\sqrt{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 + 1}} \right) \right) + a\nabla^2\phi.$$

В [2] показано, что основными типами ДДС, возникающими в поле $h(t) = h_0 \sin \omega t$, являются однорукавные и двурукавные спиральные домены (рис. 1а и б, соответственно). В настоящей работе установлен диапазон значений эффективного параметра анизотропии k и амплитуд поля h_0 , в котором происходит возникновение спиральных доменов, (рис. 1в) и проведено сопоставление с экспериментальными данными. Известно, что константа одноосной наведённой анизотропии плёнок ферритов-гранатов убывает с ростом температуры, что позволяет указать на качественное соответствие полученных результатов с экспериментальными данными из работы [4] (рис. 1г): 1) общая область существования СД ограничена как сверху, так и снизу по обеим осям, 2) область двурукавных СД соответствует более низким амплитудам, 3) у верхней границы области однорукавных СД существует максимум при некотором значении $k(T)$.

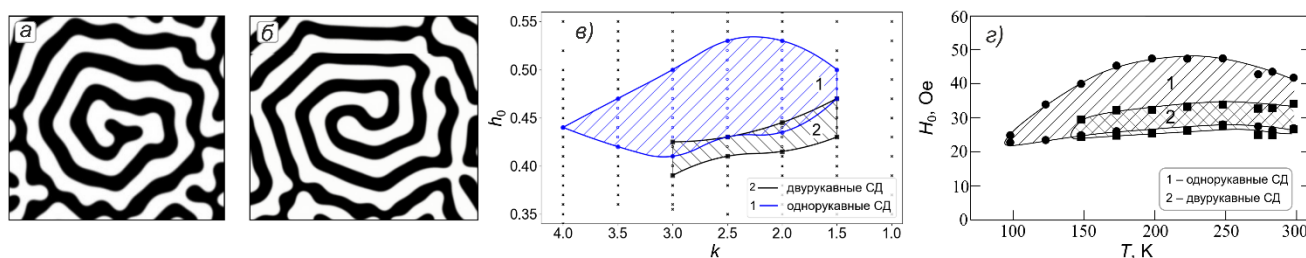


Рис. 1. Примеры однорукавного СД (а) и двурукавного СД (б), полученные в результате численного моделирования; области существования СД в гармоническом поле частотой $\omega = 9,0 \cdot 10^{-4}$ при значении эффективного параметра обмена $a = 3,2 \cdot 10^{-3}$ (в); экспериментально установленные области существования СД в плёнке $\text{YLuBi}_3(\text{FeGa})_5\text{O}_{12}$ при частоте переменного поля $f = 5 \cdot 10^3$ Гц (г) [4]

Также в настоящей работе проведено исследование корреляции границ области существования СД в гармоническом поле с количественными характеристиками процессов перемангничивания, такими как H_c — коэрцитивная сила (рис. 2а), и количество разрывов доменной границы в единицу времени (рис. 2б). Получено, что возрастание коэрцитивной силы коррелирует с верхней границей области при больших

эффективных параметрах анизотропии k . При малых параметрах анизотропии с верхней границей области связано возникновение разрывов доменной границы в процессе перемангничивания.

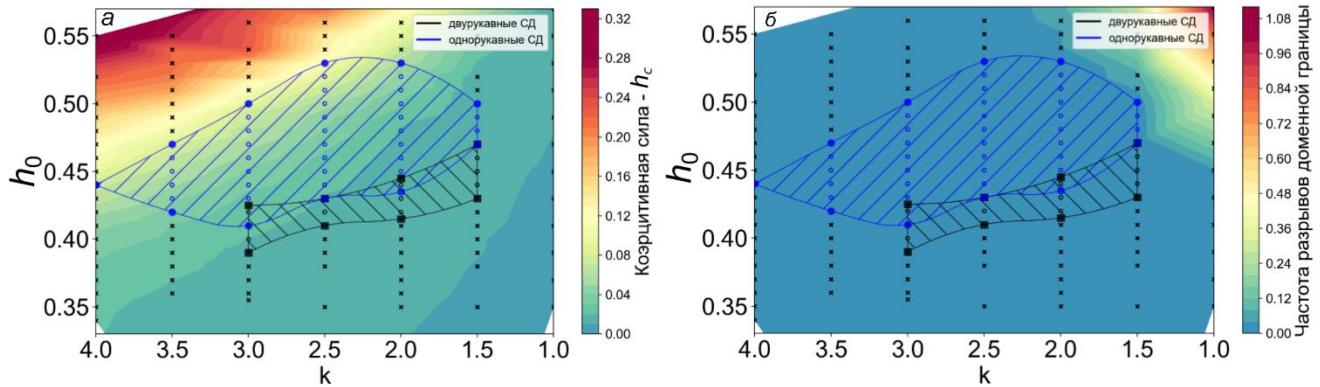


Рис. 2. Диаграммы коэрцитивной силы (а) и частоты разрывов доменных границ в условных единицах (б)

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания на 2026–2028 гг. (тема FEUZ-2026-0016).

Литература

1. Кандаурова Г. С. Новые явления в низкочастотной динамике коллектива магнитных доменов // УФН. 2002. Т. 172, №. 10. С. 1165-1187.
1. Мехоношин Д. С., Памятных Л. А. Механизм самоорганизации доменной структуры в магнитных пленках в модели Гинзбурга–Ландау // Письма в ЖЭТФ. 2024. Т. 120. №. 4. С. 260-266.
2. Jagla E. A. Hysteresis loops of magnetic thin films with perpendicular anisotropy // Phys. Rev. B. 2005. V. 72(9): 094406.
3. Щетников О.П. [и др.]. Влияние температуры на формирование спиральных динамических магнитных доменов в пленках ферритов-гранатов // Известия РАН. Сер. физ. 2014. Т. 78, № 9. С. 1194.

Бриллюэновский лазер в качестве генератора случайных чисел

А. Р. Мухамедянов¹, Е. С. Андрианов¹, А. А. Зябловский¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В данной работе рассмотрена оптомеханическая система, состоящая из двух оптических мод, которые взаимодействуют с модой механических колебаний (фононом). Продемонстрировано, что в такой оптомеханической системе существуют спонтанные переходы между состояниями, которые можно использовать в качестве генератора случайных чисел.

Немарковское влияние спектрального фильтра на статистические свойства излучения однофотонного источника

И.В. Панюков^{1,2,3}, Е.С. Андрианов^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова

³Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Однофотонные источники обладают низкой автокорреляционной функцией второго порядка, благодаря чему имеют широкую область применений, которая включает квантовую криптографию [1] и обработку квантовой информации [2]. Основным методом прямой интеграции однофотонных источников со встроенными нанofотонными структурами является резонаторы. Предполагается, что использование резонаторов для интеграции однофотонных источников света позволит обеспечить преимущества, связанные с эффективностью и стабильностью устройства, а также простотой его управления. Резонаторы искажают спектр света, испускаемого однофотонными источниками, усиливая одни компоненты спектра и подавляя другие [3]. Статистические свойства отдельных спектральных компонент, в общем случае, могут отличаться от статистических свойств всего света, содержащего все спектральные компоненты. Таким образом, резонаторы, которые используются для сопряжения однофотонных источников с фотонными схемами, выступают в роли спектральных фильтров, влияя на однофотонные свойства результирующего излучения. При рассмотрении проблемы влияния спектрального фильтра на статистические свойства излучения однофотонного источника обычно пренебрегают влиянием спектрального фильтра на динамику однофотонного источника, учитывая лишь частотную фильтрацию испускаемого им света [4]. Однако в общем случае это влияние имеет место быть и требует описания. Физически данное влияние соответствует отражению излучения однофотонного источника от фильтра обратно к однофотонному источнику. Наиболее актуальна потребность в описании влияния спектрального фильтра на динамику однофотонного источника в режиме сильной связи, когда энергия взаимодействия однофотонного источника и спектрального фильтра достаточно велика.

В этой работе мы рассматриваем однофотонный источник в одномодовом резонаторе, который выступает в роли лоренцева спектрального фильтра. Мы исследуем влияние спектрального фильтра на динамику однофотонного источника в марковском приближении. Мы показываем, что в марковском приближении спектральный фильтр не оказывает качественного влияния на динамику однофотонного источника, но оказывает количественное влияние, изменяя его константы релаксации. Мы исследуем пределы применимости марковского приближения для расчета автокорреляционной функции второго порядка излучения однофотонного источника, прошедшего через спектральный фильтр. Мы показываем, что марковское приближение хорошо описывает поведение автокорреляционной функции второго порядка. Наибольшие расхождения между марковским приближением и точным численным расчетом возникают в режиме сильной связи, когда спектр излучения системы состоит из двух едва различимых пиков. Когда пики становятся хорошо различимы, марковское приближение работает из-за большой константы Раби взаимодействия однофотонного источника и резонатора, что приводит к усреднению вкладов предыдущих моментов времени в динамику однофотонного источника в текущий момент времени в силу осцилляций, частота которых определяется расстоянием между пиками в спектре излучения. В режиме слабой связи при большей скорости затухания резонатора марковская динамика объясняется экспоненциальным подавлением вкладов предыдущих моментов времени.

Литература

1. Hughes R. J. [et al.]. / Quantum cryptography // Contemporary Physics. – 1995. – Т. 36. – №. 3. – С. 149-163.
2. Förtsch M. [et al.]. A versatile source of single photons for quantum information processing // Nature communications. – 2013. – Т. 4. – №. 1. – С. 1818.
3. Bakker R. M. [et al.]. Enhanced localized fluorescence in plasmonic nanoantennae // Applied Physics Letters. – 2008. – Т. 92. – №. 4.
4. del Valle E. [et al.]. Theory of frequency-filtered and time-resolved n-photon correlations // Physical review letters. – 2012. – Т. 109. – №. 18. – С. 183601.

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ В ТЕОРИИ ГОМОГЕНИЗАЦИИ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

П.А. Лебедев^{1,2}, А.И. Игнатов^{2,3}, А.М. Мерзликин²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

³Всероссийский НИИ автоматики имени Н.Л. Духова

Композитные материалы давно стали неотъемлемой частью технологий современного мира. Всё большее прикладное значение имеет создание структур с необходимыми электродинамическими характеристиками. У некоторых композитов необходимые характеристики, иногда в принципе не встречающиеся у природных однородных материалов, обеспечиваются в том числе посредством периодизации их структуры. В подавляющем большинстве случаев последняя кусочно-однородна. Периодически структурированные композиты называются фотонными кристаллами (ФК). Наша способность надёжно и точно рассчитывать и, соответственно, предсказывать макроскопические характеристики композитов (в основном речь об эффективных диэлектрической и магнитной проницаемостях) по их микроскопической структуре и составу напрямую влияет на нашу способность их создавать, придавая необходимые под ту или иную задачу свойства и при этом сводя к минимуму число слепых проб и ошибок.

Теории, позволяющие в ряде случаев перейти от микроскопических параметров композитов к макроскопическим параметрам эффективно однородных сред, называются теориями гомогенизации. Заметим, что существует множество разных подходов к гомогенизации, дающие разные результаты. Есть феноменологические – в качестве примеров можно привести аппроксимацию Максвелла Гарнетта или теорию Бруггемана, есть точные (в некотором смысле).

К точным (иногда предельным) теориям можно отнести

- Г-конвергенцию, дающую точное значение тензора эффективной диэлектрической проницаемости (ε_{ij}^{eff}) в случае электростатического поля [1-3]. Данная теория позволяет в некотором смысле усреднить уравнение Лапласа для периодических систем, а именно перейти от уравнения

$$\sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) \frac{\partial \phi(\mathbf{r})}{\partial x_j} = 0$$

$$\sum_{i,j} \varepsilon_{ij}^{eff} \frac{\partial^2 \phi_0(\mathbf{r})}{\partial x_i \partial x_j} = 0$$

Где под $\phi_0(\mathbf{r})$ подразумевается функция в разложении

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{+\infty} \left(\frac{a}{L}\right)^n \phi_n(\mathbf{r})$$

Где a – линейный размер элементарной ячейки, а L – линейный размер образца

- Теорему Блоха (Флоке-Ляпунова)
Пусть имеется ФК с (в общем случае 3D) периодически распределённой диэлектрической проницаемостью: $\varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \varepsilon(\mathbf{r})$
Где $\mathbf{a}$ – любой вектор пространственной трансляции, относительно которой структура ФК остаётся инвариантной.

$$\Phi(\mathbf{r}, \omega) = \begin{pmatrix} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \end{pmatrix}$$

$$\Phi(\mathbf{r}, \omega) = \sum_{\mathbf{k}_b} e^{i \mathbf{k}_b(\omega) \mathbf{r}} \mathbf{U}_{\mathbf{k}_b}(\mathbf{r}, \omega)$$

где $\mathbf{U}_{\mathbf{k}_b}(\mathbf{r}, \omega)$ – пространственно-периодическая функция:

$$\mathbf{U}_{\mathbf{k}_b}(\mathbf{r} + \mathbf{a}, \omega) = \mathbf{U}_{\mathbf{k}_b}(\mathbf{r}, \omega)$$

а $k_b(\omega)$ – так называемый блоховский волновой вектор
 С учётом этой теории можно определить показатель преломления среды как

$$n_{eff}(\omega) = \frac{k_b(\omega)}{k_0(\omega)}$$

$$k_0(\omega) = \frac{\omega}{c}$$

Научный интерес представляет исследование согласованности этих теорий. Но одна из них (Г-конвергенция) электростатическая, а другая (теорема Блоха-Флоке-Ляпунова) – электродинамическая.

Сравнение этих двух теорий можно произвести, перейдя в блоховской теории к электростатическому пределу: $\omega \rightarrow 0$. После чего, можно сравнить $n_{eff}|_{\omega \rightarrow 0}$ и $\sqrt{\epsilon_{eff}}$

Что, например, было сделано в работе [4], численно, для некоторых частных случаев двумерных фотонных кристаллов.

В настоящей работе исследуется электростатический предел блоховской теории, причём как численно, так и аналитически, для ФК разной размерности и разного профиля пространственного распределения диэлектрической проницаемости. Рассмотрены разные частные случаи, но вместе с тем исследован и переход к пределу в более общем случае. Исследованы границы применимости подходов, основанных на теории возмущений.

Литература

1. N. S. Bakhvalov and G. Panasenko, Homogenisation: Averaging Processes in Periodic Media: Mathematical Problems in the Mechanics of Composite Materials (Springer, New York, 2012).
2. E. Sánchez-Palencia, Non-Homogeneous Media and Vibration Theory — Springer, Berlin, 1980.
3. V. V. Zhikov, S. M. Kozlov, O. A. Oleinik, and K. T. Ngoan Averaging and g-convergence of differential operators // Russ. Math. Surv. 1979 V. 34. P. 65-133.
4. S. A. Rodionov, A. M. Merzlikin Effective Refractive Index of 2D Porous Composite Materials // Journal of Experimental and Theoretical Physics, 2022, V. 134, N. 5, P. 600–606

Метастабильные состояния и флуктуации проводимости в перколяционных мемристивных системах

П.О. Ксенофонтова^{1,2}, Р.Т. Сибатов²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Научно-производственный комплекс «Технологический центр»

Наноструктурированные перколяционные системы с мемристивностью, в частности сети нанопроволок [1] и островковые тонкие плёнки [2] на основе серебра (ОПС), рассматриваются в ряде работ в качестве перспективных компонентов для аппаратной реализации нейроморфных вычислений. Принципиальным условием их эффективного функционирования, например, в схемах резервуарных вычислений, является нахождение системы вблизи порога перколяционного перехода [2, 3]. В данном состоянии даже слабое локальное воздействие способно индуцировать глобальную перестройку проводящих путей. Такие системы характеризуются сложной нелинейной динамикой, при этом флуктуации кондактанса носят стохастический характер даже в условиях приложения постоянного напряжения [1].

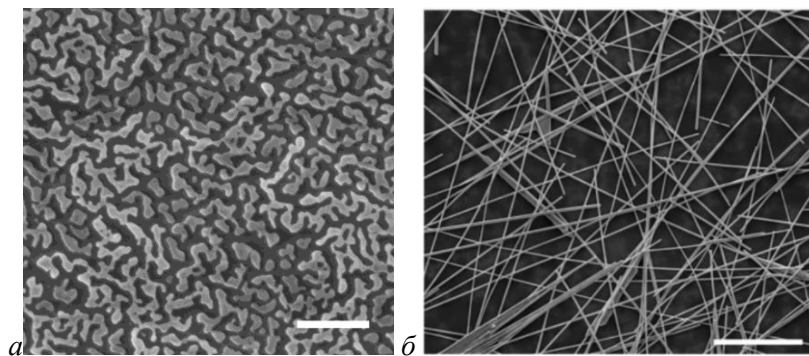


Рис. 1. Морфология исследуемых образцов (а) РЭМ изображения кластеров ОПС, масштаб 1 мкм, (б) РЭМ изображение системы нанонитей в работе [1], линейка 5 мкм.

В данной работе исследовался вопрос о существовании динамических метастабильных значений кондактанса (аттракторов) при постоянном напряжении, а также о характере установления и удержания данного равновесия. Установлено, что усреднённая динамика в переходном процессе описывается функцией релаксации Миттаг-Леффлера, что соответствует уравнению релаксации с дробной производной Капуто по времени:

$$\frac{d^\alpha g}{dt^\alpha} = \theta(\tilde{g} - g), \quad (1)$$

где $\alpha < 1$. Решением уравнения является функция вида:

$$g(t) = g_0 + (\tilde{g} - g_0) \cdot \left(1 - E_\alpha(-\theta t^\alpha)\right), \quad (2)$$

где $E_\alpha = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + 1)}$ - однопараметрическая функция Миттаг-Леффлера, $\Gamma(\alpha k + 1)$ - гамма-

функция, g_0 - начальное значение проводимости.

После выхода на динамическое равновесие кондактанс флуктуирует около метастабильного значения (рис. 2). Проведённый анализ флуктуаций кондактанса вблизи метастабильного значения выявил наличие двух компонент: мелкомасштабных отклонений, подчиняющихся гауссову распределению (гауссов шум), и крупномасштабных редких событий, распределение которых характеризуется степенным хвостом (Леви-скачки)[2]. Корреляционный анализ данных флуктуаций позволил установить взаимосвязь между указанными компонентами. При построении накопленных сумм отклонений обнаружено, что Леви-скачки компенсируются мелкомасштабным шумом. Другими словами, имеет место стохастический пиннинг кондактанса, обусловленный динамикой формирования и разрушения филаментов в межсоединениях между нанопроволоками либо островками плёнки.

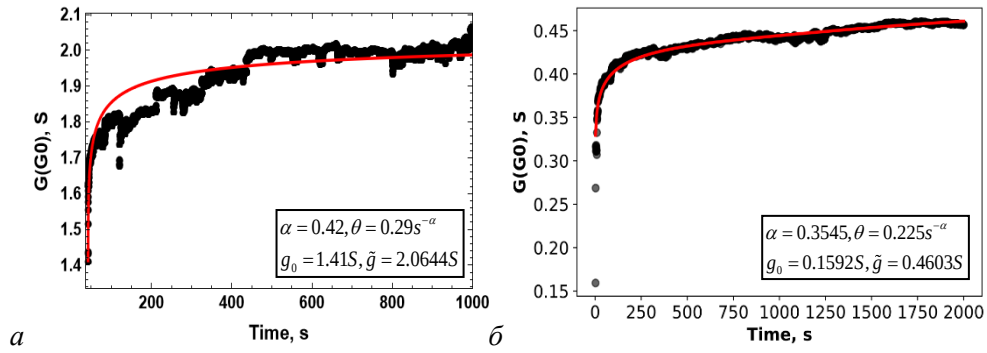


Рис. 2. Аппроксимация проводимости (а) ОПС напряжение 3В, (б) система нанонитей, напряжение 3.5В.

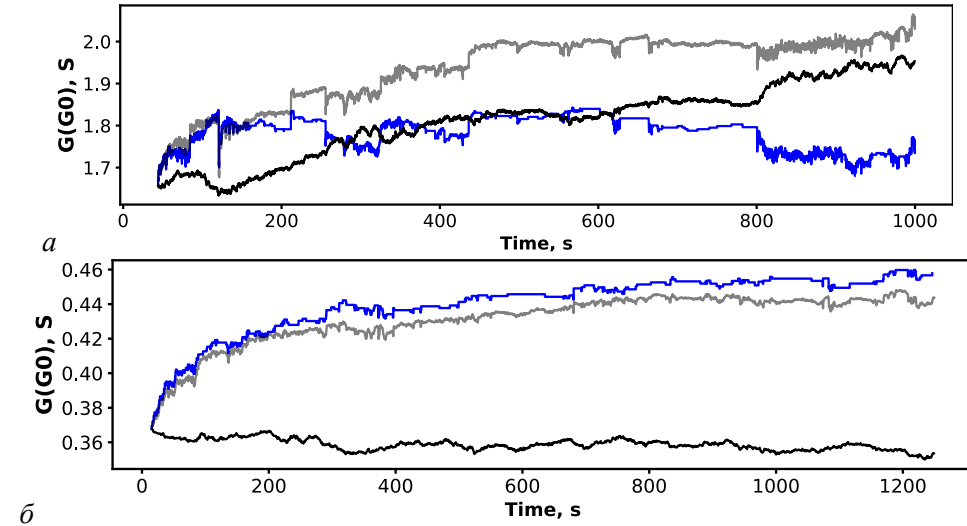


Рис. 3. Поведение скачков и шумовой составляющей серый – исходный сигнал, синий – скачки, черный - шум: (а) ФОПС напряжение 3В, (б) система нанонитей, напряжение 3.5В.

Принципиально важным является различие в поведении скачкообразных событий и фонового шума (рис. 3). Микроскопическое объяснение наблюдаемой динамики кондактанса опирается на стохастическое обобщение уравнения, которое ранее было предложено для описания роста и разрушения токопроводящих филаментов в межсоединениях между нанопроволоками или островками плёнки. Исходное уравнение [4] было детерминистическим: оно задавало скорость изменения проводимости как функцию приложенного напряжения и текущего состояния филамента. Однако экспериментальные данные показывают, что реальная динамика значительно флуктуирует. Чтобы учесть это, в уравнение вводятся случайные компоненты. Они отражают случайные тепловые флуктуации и локальные вариации потенциала в межсоединениях. Такое стохастическое обобщение позволяет описывать не только среднюю скорость эволюции филаментов, но и вероятностное распределение событий их роста и разрушения.

Работа выполнена в рамках гос. задания Министерства науки и высшего образования РФ (проект FNRМ–2025–0010).

Литература

1. Milano G. et al. Self-organizing neuromorphic nanowire networks as stochastic dynamical systems //Nature Communications, 2025. V. 16(1). P. 3509.
2. Ксенофонтова П. О. и др. Наблюдение динамического флуктуационного фазового перехода проводимости островковой пленки серебра //Современная электродинамика, 2025. V. 4(18). P. 04-12.
3. Gronenberg O. [et al]. In situ imaging of dynamic current paths in a neuromorphic nanoparticle network with critical spiking behavior //Advanced Functional Materials, 2024. V. 34(28): 2312989.
4. Ксенофонтова П.О., Василевская Ю.О., Сибатов Р.Т. Кинетическая модель эволюции филаментов в перколяционном массиве наночастиц серебра //Ученые записки физического ф-та Московского университета, 2024, №4, 2441401.

Решение нестационарной задачи рассеяния металлическим объектом в приближении физической оптики

И. С. Суюндуков^{1,2}, А. М. Лебедев²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН,

Разрабатывается процедура расчета нестационарного поля рассеяния, создаваемого в дальней зоне большим металлическим объектом, в приближении физической оптики. Электрическое и магнитное поля рассеянной волны в дальней зоне выражаются через производную векторного потенциала по времени [1]:

$$\mathbf{E}_{\text{расс}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c} \left(\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \times \mathbf{u} \right) \times \mathbf{u}, \quad (1)$$

$$\mathbf{H}_{\text{расс}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \times \mathbf{u}, \quad (2)$$

где $\mathbf{u} = \mathbf{r}/r$ — единичный вектор в направлении наблюдения.

Алгоритмическую основу составляет расчет поля рассеяния металлическим треугольником. Получено аналитическое выражение для производной по времени от векторного потенциала в дальней зоне, создаваемого физико-оптическим поверхностным током на идеально проводящем треугольном элементе при падении произвольного плоского волнового пакета. Производная векторного потенциала токов на треугольнике имеет вид

$$\frac{\partial \mathbf{A}_{\Delta}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{c^2 S}{\pi r \mathbf{m} \mathbf{b}_3} \mathbf{n} \times \left[\mathbf{u}_0 \times \left(\frac{\mathbf{I}(T + \frac{\mathbf{m} \mathbf{b}_2}{c}) - \mathbf{I}(T)}{\mathbf{m} \mathbf{b}_2} - \frac{\mathbf{I}(T + \frac{\mathbf{m} \mathbf{b}_1}{c}) - \mathbf{I}(T)}{\mathbf{m} \mathbf{b}_1} \right) \right], \quad (3)$$

где S — площадь треугольника, $\mathbf{n}$ — вектор нормали к его поверхности, $\mathbf{u}_0$ — единичный вектор в направлении падения волнового пакета, $\mathbf{m} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_0$, $T = t - r/c + \mathbf{m} \mathbf{r}_1/c$, $\mathbf{r}_1$ — радиус-вектор первой вершины треугольника, $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$, $\mathbf{b}_3$ — направляющие векторы его сторон. В формуле (3) функция $\mathbf{I}(t)$ представляет интеграл с переменным верхним пределом от падающего поля, определенного в начале связанной рассеивателем системы координат:

$$\mathbf{I}(t) = \int_0^t \mathbf{E}(\tau) d\tau. \quad (4)$$

Вычисления по общей формуле (3) невозможны вблизи направления наблюдения, принадлежащего конусу дифракционных лучей вокруг i -го ребра треугольника, когда $\tau_i = \frac{\mathbf{m} \mathbf{b}_i}{c}$ стремится к нулю, а также вблизи направления зеркального отражения луча от поверхности треугольника и теневого направления, когда все τ_i одновременно стремятся к нулю. Отметим, что указанные направления соответствуют максимумам второго и первого порядков эффективной площади рассеяния (ЭПР) треугольника, и правильный расчет интенсивности рассеяния для этих случаев особенно важен при оценке радиолокационной заметности объектов.

Для обеспечения устойчивых вычислений вводится пороговое значение p для τ_i , определяющее условие перехода от вычислений по общей формуле (3) к вычислениям с использованием частных выражений, полученных разложением $\mathbf{I}(T + \tau_i)$ по формуле Тейлора до четвертого порядка малости. Общая формула применяется при выполнении условий $|\tau_1| > p$, $|\tau_2| > p$ и $|\tau_3| > p$; в противном случае используются специальные выражения для трёх частных случаев малости одного из τ_i , $i = 1, 2, 3$, и предельного случая одновременной малости всех параметров τ_i (все конусы дифракционных лучей пересекаются в направлениях зеркального отражения луча и в теновом).

Оптимальное значение p определяется из условия равенства оценок погрешностей общего и частных выражений с учётом дискретизации по времени. Получено уравнение пятой степени относительно p , зависящее от шага дискретизации h по времени и верхней частоты спектра падающей волны f . Показано, что отклонение p от оптимального значения приводит в окрестности максимумов ЭПР либо к искажению диаграммы рассеяния (при завышенном пороге), либо к росту дискретизационных ошибок и численного шума (при заниженном пороге).

При облучении треугольника радиоимпульсом рассеянный сигнал имеет сложную структуру во времени: начальную и конечную части, связанные с заходом падающей волны на треугольник и сходом

с него, и среднего интервала рассеяния в установившемся режиме. На рис. 1 приведены три графика ЭПР треугольника, вычисленные по амплитуде осцилляций рассеянного поля в установившемся режиме, в зависимости от угла наблюдения вблизи теневого максимума при трех значениях порога $p = p_{opt}$, $p = 5p_{opt}$ и $p = p_{opt}/5$, где p_{opt} — оптимальное значение. Также на рис. 1 приведен график ЭПР треугольника, полученный из решения монохроматической задачи для частоты, равной частоте заполнения радиоимпульса, с помощью программы электродинамического моделирования FEKO [2]. Сравнение всех графиков демонстрирует критическую роль корректного выбора порога p в угловой окрестности направления теневого максимума, а также показывает высокую точность численного решения нестационарной задачи рассеяния треугольником при условии оптимального выбора порога.

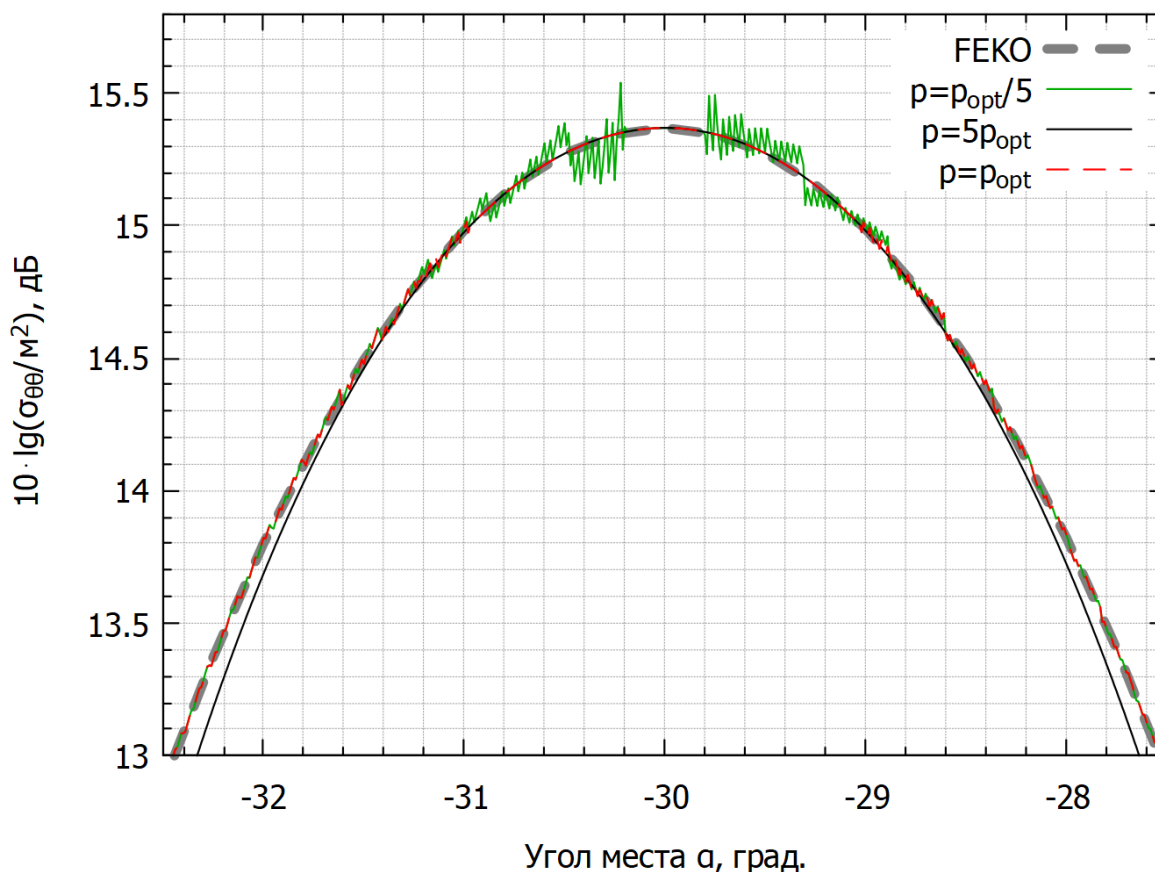


Рис 1. Зависимости ЭПР треугольника от угла наблюдения вблизи теневого максимума, полученные из решения монохроматической задачи на частоте, равной частоте заполнения радиоимпульса, и из решения нестационарной задачи при $p = p_{opt}$, $p = 5p_{opt}$ и $p = p_{opt}/5$

Отработанные приемы решения нестационарной задачи рассеяния обеспечивают выполнение точного расчета рассеяния широкополосных импульсов металлическим объектом при оценке его радиолокационной заметности.

Литература

1. Ландау Л., Лифшиц Е. Теория поля. — М.: Наука, 1973.
2. FEKO, <https://www.altair.com>

Моделирование идеальной плоской линзы методом физоптики

Д. П. Королев^{1,2}, Н. Л. Меньших^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Плоская линза представляет собой плоскопараллельную пластину, в которой показатель преломления материала меняется по заданному закону. Такие линзы широко применяются в антенной технике, для увеличения коэффициента усиления антенн. Однако, их можно использовать и для создания плоской волны в компактных полигонах, где широко распространены гиперболические или эллиптические линзы [1]. Так, в работе [2] было показано, что коллиматор в виде плоской линзы в рупорной безэховой камере создаёт поле с неравномерностью распределения амплитуды и фазы не большей, чем коллиматор в виде гиперболической линзы. При этом, плоская линза потенциально может быть легче, проще в изготовлении и использовании.

В рамках задачи создания эффективного коллиматора для модели рупорной безэховой камеры в масштабе 1:22 [3], с исследуемым диапазоном частот 8-12 ГГц, рассматривается модель, использующая методы физической оптики для расчёта распределения поля, формируемого линзой в камере.

При моделировании с помощью метода физической оптики показатель преломления линзы и преломление луча в линзе задаются формулами для обобщённой линзы Микаэляна [4]:

$$n(y) = \frac{n_0 d_0 - f(\sec \theta - 1)}{d_0 \cosh\left(\frac{\pi(y-y_1)}{2d_0}\right)}, \quad (1)$$

$$y = y_1 + \frac{2d_0}{\pi} \operatorname{arcth}\left(\frac{d_0 y_1}{\sqrt{f^2 + y_1^2}(n_0 d_0 + f - \sqrt{f^2 + y_1^2})}\right), \quad (2)$$

где n_0 – показатель преломления в центре линзы, d_0 – толщина линзы, f_0 – фокусное расстояние, y_1, y – точка падения луча на линзу и точка, в которую пришёл преломлённый луч, соответственно.

Комплексная амплитуда поля в физоптической модели линзы (рис. 1) рассчитывается с помощью интеграла Кирхгоффа [5]:

$$U(p, q, h) = \iint_S d\zeta \cdot d\psi \cdot t(\theta, n(\zeta, \psi)) \cdot t'(\theta, n(\zeta', \psi')) \cdot f(\theta) \cdot \frac{e^{-ik \cdot r(\zeta, \psi, \xi)}}{|r(\zeta, \psi, \xi)|} \cdot \frac{e^{-i \cdot n(\zeta, \psi) \cdot k \cdot l(\theta, n(\psi, \xi))}}{l(\theta, n(\psi, \xi))} \cdot \frac{e^{-i \cdot k \cdot (r(p, q, h) - r(\zeta', \psi', \xi'))}}{|r(p, q, h) - r(\zeta', \psi', \xi')|} \cdot (\cos \theta - \cos \theta'), \quad (3)$$

где (ζ, ψ, ξ) и (ζ', ψ', ξ') – точки на поверхности линзы, t, t' – коэффициенты прохождения через поверхности линзы, $f(\theta)$ – диаграмма направленности источника, l – длина дуги окружности, которая используется как приближение траектории луча в линзе.

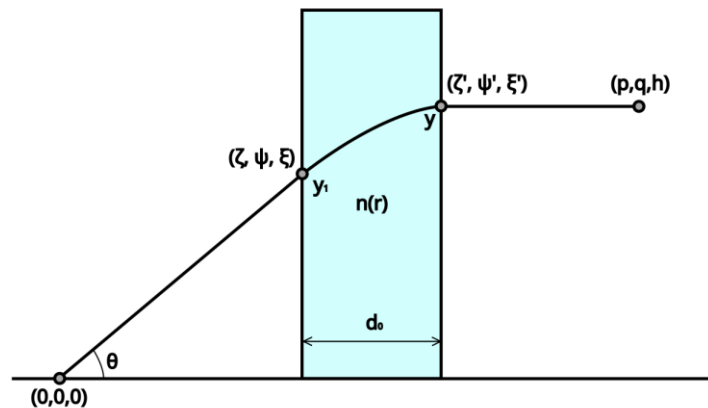


Рис. 1. Ход лучей в обобщённой линзе Микаэляна

Для верификации физоптической модели проводилось моделирование формирования поля плоской линзой с использованием Altair FEKO методом моментов. Так как электродинамическое моделирование вместе с рупорной безэховой камерой сильно усложнило бы модель, отдельно рассчитывалось поле, создаваемое в апертуре рупорной камеры рупорным облучателем. Далее подбирался источник, создающий такое же распределение поля без безэховой камеры. В итоговой модели использовалась диаграмма направленности подобранного источника. Так как реализовать линзу с непрерывно меняющимся показателем преломления средствами Altair FEKO невозможно, вместо этого использовалась модель, состоящая из 10 слоёв одинаковой толщины, величина показателя преломления, в каждом слое равна показателю преломления идеальной линзы на расстоянии от оси линзы, равном расстоянию, на котором находится середина слоя. Показатель преломления внутри каждого слоя постоянен, потери в диэлектрике не учитывались, также как и в физоптической модели. Количество слоёв выбрано так, чтобы при дальнейшем увеличении количества слоёв, распределение поля практически не менялось.

Расчёт такой линзы с помощью FEKO даёт убедительные результаты, однако даже с использованием больших вычислительных мощностей кластера занимает десятки часов, тогда как физоптическая модель может быть рассчитана на личном ПК в течение нескольких минут. Примеры результатов расчётов распределения фазы и амплитуды в срезе, перпендикулярном оси линзы, с помощью рассмотренных моделей представлены на рис. 2.

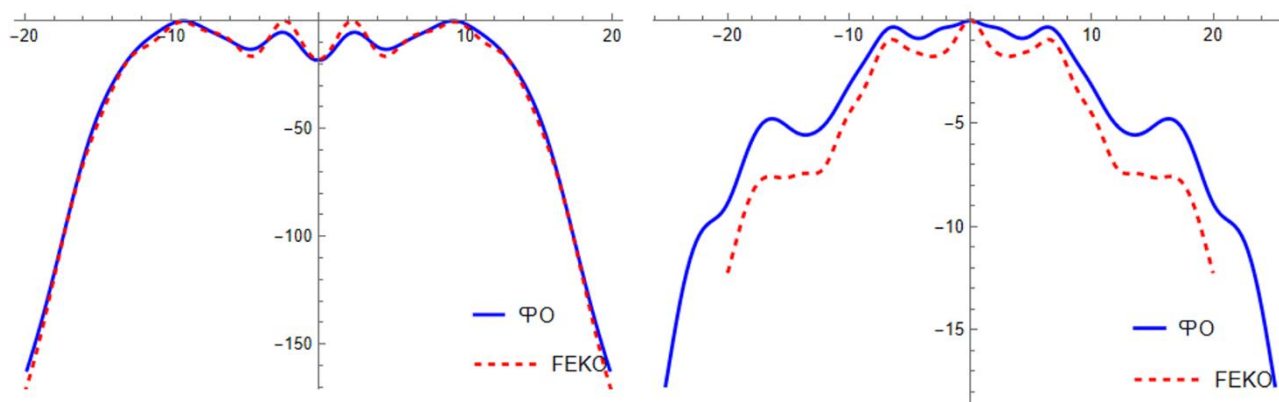


Рис. 2. Распределение фазы и амплитуды поля на расстоянии 10 см от линзы, частота 10 ГГц

Физоптическая модель достаточно точно показывает расположение максимумов и минимумов распределения амплитуды и фазы электромагнитного поля, однако значения могут отличаться на 5-10° по фазе и на 1-2 дБ по амплитуде. На небольших расстояниях от линзы расхождения больше, что вероятно, связано с влиянием переотражений, которые не учитываются в рассмотренной физоптической модели, однако могут быть учтены в дальнейшем. Кроме того, амплитуда везде рассчитывается менее точно. Однако, на расстоянии 20 см от линзы и больше, в пределах рабочей зоны от -6,6 см до 6,6 см, физоптическая модель позволяет достаточно точно и быстро рассчитать фазу и амплитуду поля, что полезно для поиска оптимальных параметров линзового коллиматора.

Литература

1. Балабуха Н.П., Зубов А.С., Солосин В.С. Компактные полигоны для измерения характеристик рассеяния объектов – М.: Наука, 2007. С. 41-44.
2. Balabukha N.P., Menshikh N.L., Solosin V.S. Development of a Plane Lens for a Tapered Anechoic Chamber // Proceedings - 2022 IEEE 8th All-Russian Microwave Conference, P. 187–190.
3. Д. П. Королев, Н. Л. Меньших, С. А. Федоров Плоская линза как коллиматор для рупорной безэховой камеры // Современная электродинамика. 2025. №4 (18). С. 13-23.
4. Зелкин Е.А., Петрова Р.А. Линзовые антенны. – М.: Советское радио, 1974. С. 135–137.
5. М. Борн, Э. Вольф Основы оптики – М.: Наука, 1973. С. 348-356.

Параллельный алгоритм для ускоренного расчета электромагнитного рассеяния на полости с импедансными стенками с использованием графических процессоров

А. С. Маслов^{1,2}, В. Н. Кисель¹

¹ Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Для решения задач электромагнитного рассеяния на сложных объектах часто применяется строгий метод интегральных уравнений (ИУ), которые обычно решаются методом моментов (ММ). Этот подход позволяет учитывать все дифракционные явления, однако его применимость к электрически большим объектам ограничена объемом доступной оперативной памяти ЭВМ и длительностью расчетов из-за необходимости решать системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с большим количеством неизвестных [1]. Широко распространен приближенный метод физической оптики (ФО) [1-3], который не предполагает составления СЛАУ и поэтому позволяет моделировать электрически большие объекты. Однако его классическая формулировка неприменима к расчету рассеяния от протяженных полостей, поскольку этим методом не учитываются многократные переотражения электромагнитной волны внутри полости. Этот недостаток исключен в разработанной позднее модификации метода, итерационном алгоритме физической оптики (ИФО), который учитывает взаимодействие рассеивающих поверхностей и поэтому пригоден для расчета рассеяния от полостей больших электрических размеров [2, 3].

Для изменения характеристик рассеяния полостей на практике применяются различные покрытия, которые могут быть многослойными и иметь сложную структуру, как например, покрытия на основе метаматериалов. Для значительного ускорения расчетов и упрощения процедуры оптимизации параметров покрытия вводится понятие поверхностного импеданса, который связывает касательные компоненты электрического и магнитного полей на поверхности покрытия. В итоге, процесс подбора параметров покрытия сводится к поиску оптимального значения импеданса стенок полости, а затем к подбору покрытия, импеданс которого будет наиболее точно соответствовать найденному значению. Поэтому большую практическую ценность имеет разработка эффективного алгоритма для моделирования полостей с импедансными покрытиями и исследование возможностей его ускорения.

Для ускорения расчетов разработаны параллельные версии алгоритма ИФО для многоядерных компьютеров с использованием технологии OpenMP [3], а для вычислительных кластеров обычно применяется технология MPI. В настоящее время ведутся исследования по использованию для этой цели графических процессоров (GPU). В литературе есть примеры успешного применения реализации на GPU алгоритма ИФО для решения задач рассеяния на выпуклых объектах и для моделирования электрически больших, но при этом коротких полостей [4-6]. В данной работе исследуется эффективность различных стратегий распараллеливания ИФО на GPU для ускорения моделирования электрически больших и длинных полостей, подчеркиваются особенности использования GPU по сравнению с процессорами общего назначения. Валидация разработанного алгоритма выполняется путем сравнения результатов моделирования с расчетами на основе строгого метода ИУ, реализованного в САПР FEKO.

Литература

1. Gibson W. The Method of Moments in Electromagnetics. — Milton Park: CRC Press, 2015.
2. Obelleiro-Basteiro F., Rodriguez J., Burkholder R. An iterative physical optics approach for analyzing the electromagnetic scattering by large open-ended cavities // IEEE Trans. Antennas Propag. 1995. V. 43(4). P. 356-361.
3. Кисель В. Н., Федоренко А. И. Совершенствование моделей для расчета рассеяния на полости сложной формы с покрытием // Седьмая ежегодная научная конференция ИТПЭ ОИВТ РАН при поддержке IEEE-APS-LEOS-CHAPTER. Сборник тезисов докладов. Под редакцией д.ф.-м.н. И.Т. Якубова – М.: ОИВТ РАН. 2006. С. 26-27.
4. Xu K. [et al.] GPU acceleration of the iterative physical optics (IPO) method // 2008 8th Int. Symp. on Antennas, Propag. and EM Theory. 2008.
5. Pajot A., Douchin N., Mametsa H.-J. Robust and GPU-accelerated IPO to improve high frequency EM scattering from large scale radar scene simulation // 2014 Int. Radar Conf. 2014.
6. Sun T.-P. [et al.] An Accelerated Time-Domain Iterative Physical Optics Method for Analyzing Electrically Large and Complex Targets // Electron. 2023. V. 12(1): 59.

Система управления оптической линией задержки реального времени для приемо-передающей системы на базе АФАР

И. Т. Гарифханов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В работе представлен результат разработки системы управления линией задержки для приемо-передающей системы на базе активной фазированной антенной решетки (АФАР) с оптической линией задержки реального времени.

Принцип действия АФАР заключается в возможности изменения направления излучения за счет перестройки амплитудно-фазового распределения токов или полей возбуждения на индивидуальных активных излучающих элементах [1].

Принцип работы линии задержки основан на чирпированной волоконной брэгговской решётке, в которой брэгговская длина волны отражения изменяется вдоль оси волокна вследствие линейного изменения периода решётки. В результате отражение разных спектральных компонентов происходит в разных точках решётки, а групповая задержка определяется расстоянием до точки отражения и становится функцией длины волны оптического сигнала. Управление задержкой реализуется дискретной перестройкой длины волны лазерного источника, что обеспечивает набор фиксированных значений задержки без изменения электрической части тракта. В разработанной установке узкополосное лазерное излучение с шириной линии порядка 5 МГц формируется перестраиваемыми модулями SFP+, а амплитудная модуляция выполняется модулятором Маха–Цендера сигналом от синтезатора; далее модулированное излучение через оптический циркулятор подаётся на чирпированную брэгговскую решётку. После отражения оптический сигнал преобразуется фотодетекторами в электрический, усиливается и подаётся на двухканальное возбуждение АФАР 2×2, что обеспечивает независимое формирование задержек в двух трактах.

Система управления источниками построена как программно-аппаратный комплекс независимого управления четырьмя оптическими каналами: микроконтроллер обеспечивает запись управляющих значений в энергонезависимую память модулей SFP+ по последовательной шине I2C. Для устранения конфликта одинаковых адресов модулей применены четыре независимых порта I2C на отладочной плате, а команды поступают с персонального компьютера по последовательному интерфейсу в формате «номер канала — номер регистра — номер спектрального канала»; прошивка микроконтроллера реализует передачу данных к выбранному модулю без обратной связи. Перестройка выполняется по дискретной сетке плотного спектрального уплотнения с шагом 50 ГГц в пределах 96 каналов оптического С-диапазона 1529,16–1567,13 нм, что задаёт дискретный набор задержек линии.

Функциональная схема системы управления представлена на рис. 1.

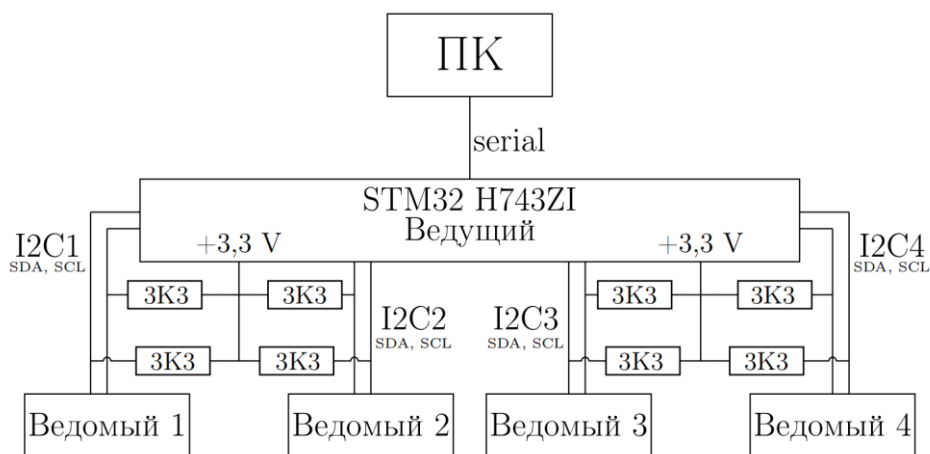


Рис. 1. Функциональная схема системы управления

Литература

1. *Воскресенский Д. И., Степаненко В. И., Филиппов В. С. [и др.]. Устройства СВЧ и антенны. Проектирование фазированных антенных решеток : учеб. пособие для вузов / ред. Д. И. Воскресенский. 4-е изд., перераб. и доп. М.: Радиотехника, 2012. 741 с. ISBN 978-5-88070-311-1.*

Оптимизация системы смещения и считывания СИС-смесителя

В. О. Киселев^{1,2}, А. В. Худченко^{2,3}, К. И. Рудаков², Я. О. Водзяновский²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Астрокосмический центр ФИАН

³ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН

СИС-смесители используются в радиотелескопах для когерентного приема радиосигналов в миллиметровом диапазоне длин волн [1]. Для обеспечения оптимального с точки зрения конверсионного усиления и шумовой температуры режима работы СИС-смесителя необходимо задавать и поддерживать напряжение смещения СИС-перехода с высокой точностью (рис. 1 из [2]), а также изолировать его от внешних наводок.

В работе использовался двухполосный СИС-смеситель для диапазона 211-275 ГГц [3], разрабатываемый для размещения на наземных и космических телескопах [4]. Упрощенная схема системы смещения СИС-смесителя приведена на рис. 2.

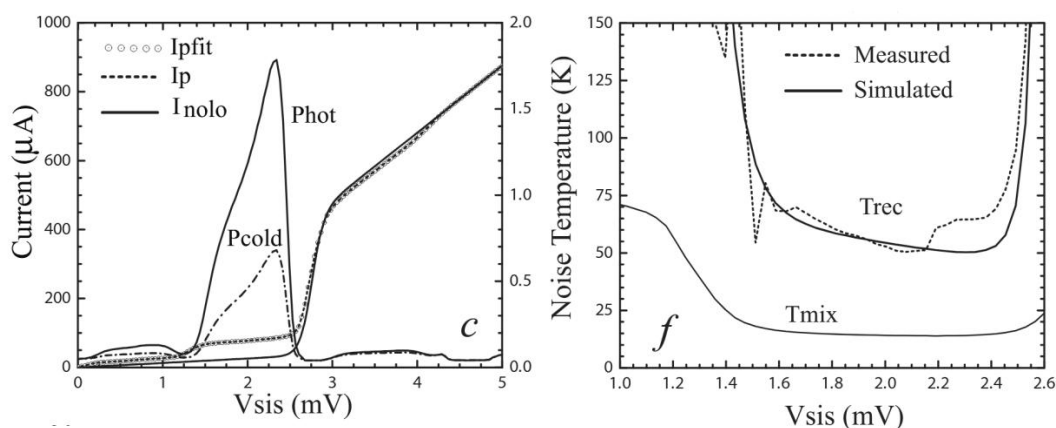


Рис. 1. Слева – зависимость отклика СИС-смесителя на промежуточной частоте от напряжения смещения при подаче на вход теплового излучения теплового и холодного черного тела, справа – зависимость шумовой температуры СИС-смесителя и приемника в целом от напряжения смещения

В ходе работы было выявлено несколько причин нестабильности напряжения смещения в имеющейся системе и внешних источников наводок, влияющих на работу СИС-смесителя, предложены и опробованы меры по их устранению или уменьшению влияния (таблица 1). В результате удалось добиться снижения размаха колебаний напряжения смещения СИС-смесителя до уровня менее 3 мкВ

Т а б л и ц а 1. Выявленные причины нестабильности напряжения смещения и источники наводок и меры по их устранению или уменьшению влияния

Причина/источник	Влияние на работу системы	Меры по устранению или уменьшению влияния
Наводки от сети переменного тока	Колебания напряжения и тока смещения на частоте 50 Гц и ее гармониках	• Экранирование цепей системы и заземление экранов • Питание системы смещения и считывания от источников питания на основе аккумуляторов вместо трансформаторного источника питания
Детектирование ВЧ наводок (в т.ч. от импульсных источников питания) из-за нелинейности ВАХ СИС-перехода	Появление дополнительного смещения (в т.ч. непостоянного во времени), искажение измеряемой ВАХ СИС-перехода	• Установка дополнительных фильтров на входе в криостат, экранирование цепей внутри криостата • Поиск, отключение или замена импульсных источников

		питания, создающих сильные помехи, на другие
Паразитные связи между цепями внутри системы смещения и считывания и помехи, генерируемые компонентами системы	Различные по свойствам колебания напряжения и тока смещения	- Питание чувствительных к помехам частей системы смещения и считывания от отдельных аккумуляторных источников питания - Изменения в электрической схеме и физической реализации системы смещения и считывания

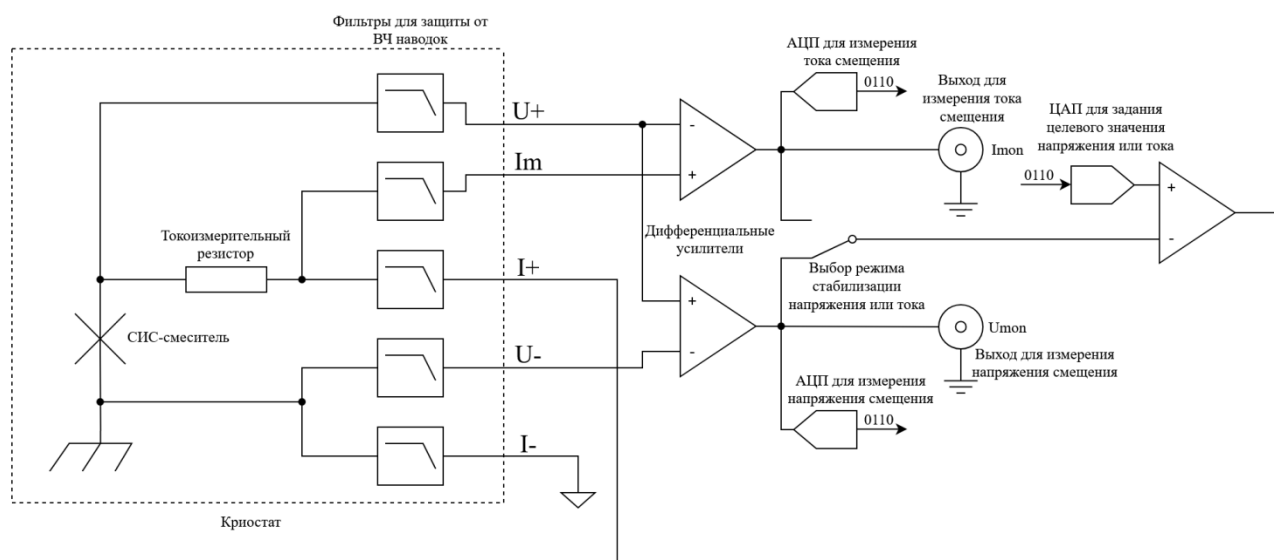


Рис. 2. Упрощенная схема системы смещения СИС-смесителя

Литература

1. Tucker, John R. and Feldman, Marc J. (1985). Quantum detection at millimeter wavelengths. *Rev. Mod. Phys.*, 57, 1055–1113.
2. J.W. Kooi. Advanced Receivers for Submillimeter and Far Infrared Astronomy. Print Partners Ipskamps B.V., Enschede, The Netherlands (2008). ISBN 978-90-367-3653-4
3. Rudakov, K.I.; Khudchenko, A.V.; Filippenko, L.V.; Paramonov, M.E.; Hesper, R.; da Costa Lima, D.A.R.; Baryshev, A.M.; Koshelets, V.P. THz Range Low-Noise SIS Receivers for Space and Ground-Based Radio Astronomy. *Appl. Sci.* 2021, 11, 10087.
4. I. D. Novikov et al., “Objectives of the millimetron space observatory science program and technical capabilities of its realization,” *Phys. Uspekhi*, vol. 64, no. 4, pp. 386–419, Jul. 2021.

ТЕХНОЛОГИЯ ФОРМИРОВАНИЯ РЕЛЬЕФА НА ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ

А. П. Шматков^{1,2}, А. С. Набоко¹, В. И. Полозов¹

¹Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН (ИТПЭ РАН)

²«Национальный исследовательский университет «МЭИ»

Формирование прецизионного микрорельефа сложной формы на поверхности монокристаллического кремния необходимо для производства микросистемной техники, а также для развития оптоэлектроники и интегральной оптики. Одним из методов, позволяющих реализовать такой профиль поверхности, является метод плазмохимического травления с использованием фторсодержащих газов и газовых смесей на их основе. Ключевыми характеристиками плазмохимического процесса являются анизотропия, селективность и скорость травления. Химический состав плазмы и тип плазмохимического процесса непосредственно влияют на данные характеристики и являются определяющими при выборе маскирующего слоя.

В рамках данной работы выполнялась оптимизация режимов плазмохимического реактивно-ионного травления и выбор материала маски для формирования на поверхности монокристаллического кремния периодического микрорельефа, обеспечивающего снижение коэффициента отражения в ИК-диапазоне.

Методика работы базировалась на последовательном применении типовых процессов микроэлектронной технологии, адаптированных для решения задачи глубокого анизотропного травления. После механохимической подготовки поверхности, включающей ультразвуковую очистку и удаление нативного оксида в плавиковой кислоте, на подложку методом электронно-лучевого испарения наносился слой хрома толщиной 30 нм, выбранный в качестве высокоадгезивного и химически стойкого маскирующего покрытия. Формирование рисунка высокоселективной маски осуществлялось последовательными процессами фотолитографии с использованием позитивного фоторезиста ФП-3513. Финальная маска получалась в процессе жидкостного травления хрома в растворе аммоний-церий(IV) нитрата через маскирующий слой фоторезиста и представляла собой двухслойную структуру металл-фоторезист. Рельеф формировался в ходе плазмохимического реактивно-ионного травления кремния в смеси тетрафторметан/аргон (CF_4/Ar). Была проведена серия последовательных процессов травления с контролем глубины рельефа после каждого процесса. Измерения осуществлялись методами атомно-силовой и сканирующей электронной микроскопии, а также интерферометрией.

В результате проведенных экспериментов и оптимизации режимов была разработана технология формирования периодического микрорельефа на поверхности монокристаллического кремния. С помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) была исследована геометрия полученного рельефа: период структуры составил 1.6 мкм, размер элемента - 800 нм. Перепад высот составил не менее 1.5 мкм. Полученный рельеф обеспечивает просветление кремния не менее чем на 10% относительно контрольных образцов.

Количественное определение клинически значимых аналитов методами гигантского комбинационного рассеяния и машинного обучения

Н.С. Фролов^{1,2}, С.И. Гудков², А.С. Набоко², В.И. Полозов², М.В. Седова², И.А. Богинская², И.А. Рыжиков^{2,3}, А.М. Мерзликин²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

³НОЦ ФМН – Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

Бруцеллез – широко распространенное зоонозное заболевание, вызываемое бактериями рода *Brucella*. Контроль над глобальным распространением бруцеллеза во многом затруднен несовершенством применяемых сегодня лабораторных тестов. Традиционные подходы к диагностике часто приводят к ложным результатам из-за иммунологического сходства классических антигенов *Brucella* с другими микроорганизмами. Эффективным решением этих проблем может стать перенос внимания на уникальный углеводный компонент бактерии — циклический β -(1→2)-d-глюкан (C β G) [1]. Исследования показывают, что использование синтезированных линейных фрагментов этого макроцикла (коротких олигоглюкозидов) позволяет выявлять специфические антитела. Этот подход закладывает принципиально новую базу для конструирования инновационных тест-систем, обладающих высочайшей селективностью именно к возбудителю бруцеллеза.

С целью количественного профилирования целевых аналитов была апробирована гибридная аналитическая методика, объединяющая алгоритмы машинного обучения и спектроскопию гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) сухих осадков. Для имитации сложной биологической матрицы (сыворотки крови человека) в водные растворы человеческого сывороточного альбумина (ЧСА, фиксированная концентрация 40,5 мг/мл) вводили исследуемые глюкозиды: макроциклический β -(1→2)-d-глюкан (C β G), а также синтетические линейные ди-, три-, тетра- и пента- β -(1→2)-d-глюкозиды. Диапазон концентраций аналитов в модельных смесях варьировался от 100 до 0,001 мг/мл (шаг десятикратного разведения).

Подготовка образцов для анализа с использованием ГКР заключалась в нанесении капель полученных модельных растворов объемом 4 мкл на поверхность поликристаллических наноструктурированных серебряных пленок. Последующее испарение растворителя в изотермических условиях (25 °С) приводило к формированию сухих осадков. Регистрация спектров ГКР осуществлялась при возбуждении лазером с длиной волны 532 нм. Для максимизации детектируемого сигнала сбор данных проводился на границе краевого валика («кофейного кольца») методом линейного сканирования с пространственным шагом 2 мкм.

Для визуальной оценки потенциальной линейной зависимости спектральных данных от логарифма концентрации применялись метод частичных наименьших квадратов (PLS) и метод главных компонент (PCA). На этапе разведочного анализа метод PCA продемонстрировал сильное перекрытие спектральных кластеров. Переход к контролируемому извлечению признаков методом PLS позволил выявить линейную зависимость между латентными переменными и логарифмом концентрации для синтетических моделей ди-, три-, тетра- и пента- β -(1→2)-d-глюкозидов.

Для решения задачи количественного прогнозирования был реализован алгоритм с вложенной кросс-валидацией. Использовались такие модели как метод опорных векторов (SVR), ElasticNet и PLS. Учитывая сложность молекул, алгоритм включал этап отбора признаков (выделение Топ-200 информативных рамановских сдвигов методом PLS) для изоляции истинного химического сигнала. Оценка регрессионных моделей показала, что модели SVR, ElasticNet и PLS обладают высокой обобщающей способностью на ди-, три-, тетра- и пента- β -(1→2)-d-глюкозидах, достигая хорошей точности ($R^2 = 0,66–0,79$ на тестовой выборке). При этом количественная оценка макроциклического образца C β G продемонстрировала снижение метрик (максимальный $R^2 = 0,68$ для SVR).

Таким образом, показано, что спектральные профили ГКР синтетических линейных олигоглюкозидов, структурно связанных с циклическим β -(1→2)-d-глюканом *Brucella*, успешно поддаются количественной оценке методами машинного обучения. Такие алгоритмы, как PLS, ElasticNet и SVR, зарекомендовали себя как наиболее обоснованный и оптимальный выбор для количественного анализа концентраций.

Литература

1. *Kuznetsov A. N., Gerbst A. G., Tsvetkov Y. E.* et al. Synthesis and immunochemical studies of linear oligoglucosides structurally related to the cyclic β -(1 $\rightarrow$ 2)-d-glucan of Brucella // **Communications Chemistry**. – 2025. – Vol. 8. – Art. No. 172. – DOI: 10.1038/s42004-025-01570-7.

Спектроскопия ГКР на охлаждаемых подложках

Г. М. Янковский¹, К. К. Севастьянов^{1,2}, В. М. Путилин¹

¹Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) может использоваться для обнаружения малых концентраций различных биологических соединений. В работе для регистрации спектров ГКР используется схема на основе конфокального микроскопа.

Эффективность комбинационного рассеяния обратно пропорциональна длине волны возбуждения в четвертой степени, однако максимальная мощность возбуждающего лазерного излучения ограничена перегревом ГКР-активной подложки, который приводит к деградации образца. Для наибольшей информативности измерения проводятся для нескольких длин волн возбуждающего излучения. При использовании лазера ~ 3 мВт @ $\lambda=532$ нм деградация образца происходит уже через несколько секунд наблюдения спектров (интенсивность в фокальном пятне диаметром ~ 1 мкм составляет порядка 10^9 Вт/м²), а меньшие мощности не удовлетворяют ограничению на время накопления.

Для предотвращения перегрева образцов разработан терморегулятор на основе сборки элементов Пельтье. На рис. 1. приведена серия спектров (линии КР указаны правой стрелкой), снятая в процессе охлаждения от комнатной температуры до -5°C ; после охлаждения подложки с образцом до целевой температуры мощность лазера увеличивается до необходимого значения. Для предотвращения образования конденсата на подложке охлаждение происходит при обдуве азотом. При мощности возбуждающего излучения ~ 12 мВт образец выдерживает не менее нескольких минут облучения.

Использование охлаждаемых подложек позволит ускорить процесс снятия ГКР-спектров и устранил ошибки, вызванные изменением образца в результате перегрева.

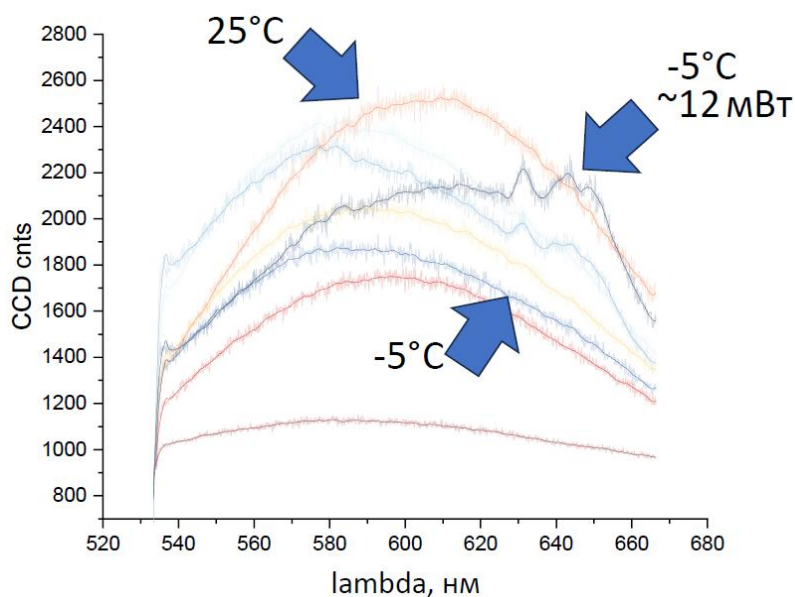


Рис. 1. Изменение спектра ГКР образца при изменении температуры подложки. Уменьшение температуры соответствует изменению цвета линии на графике от красного к синему.

