



64^{-я}
ВСЕРОССИЙСКАЯ
НАУЧНАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ
МФТИ

Министерство науки
и высшего образования РФ

Московский
физико-технический институт
(национальный исследовательский
университет)

приоритет2030[^]

Лидерами становятся

ТРУДЫ
64-й Всероссийской
научной конференции
МФТИ

**ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ
И ПРИКЛАДНАЯ
ФИЗИКА**

Москва
Долгопрудный
Жуковский
2021

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

ТРУДЫ
64-й Всероссийской научной конференции
МФТИ

29 ноября – 03 декабря 2021 года

ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА

Москва–Долгопрудный–Жуковский
МФТИ
2021

УДК 53
ББК 22.3
Т78

Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 29 ноября – 03 декабря 2021.
Т78 **Фундаментальная и прикладная физика** / сост. : К.С. Слободчук, А.В. Гец ; Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет). — Москва–Долгопрудный-Жуковский : МФТИ, 2021. – 544 с.
ISBN 978-5-7417-0785-2

•

Включены результаты оригинальных исследований студентов, аспирантов, преподавателей и научных сотрудников МФТИ и дружественных учебных и научных организаций. Статьи представляют интерес для специалистов в области фундаментальной и прикладной физики.

УДК 53
ББК 22.3

ISBN 978-5-7417-0785-2

© Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», 2021

Оглавление

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ.....	27
ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ.....	28
СЕКЦИЯ «ИТЭР – ШАГ В ЭНЕРГЕТИКУ БУДУЩЕГО».....	29
Моделирование отклика детектора на основе кристалла хлорида лантана в экспериментах с регистрацией быстрых нейтронов	
А.В. Панкратенко, Т.М. Кормилицын, А.С. Джурик, Ю.А. Кащук.....	29
Выбор оптимального метода защиты медьсодержащих сплавов в составе обращенных к плазме элементов в условиях работы в непосредственном контакте с жидким литием	
М.С. Колесник, П.Ю. Пискарев, И.В. Мазуль, В.В. Рузанов, Р.В. Рулев, А.Ю. Огурский	30
Динамика плотности и температуры в паровом экранирующем слое при интенсивном плазменном воздействии на вольфрамовые образцы	
З.И. Новоселова, И.М. Позняк, Д.А. Топорков, Д.М. Кочнев, В.Ю. Цыбенко, В.А. Костюшин, Е.Д. Федулаев, С.В. Карелов	30
Многократный отжиг бронзы CuCrZr-IG и его влияние на свойства материала	
П.Ю. Пискарев, А.А. Герваши, С.В. Бобров, В.В. Рузанов, Д.С. Мамбеткеримов	32
Испытания макета дивертора в режиме «качания» тепловой нагрузки	
Рулёв Р.В., Колесник М.С., Кузнецов В.Е., Мазуль И.В., Пискарев П.Ю., Рузанов В.В., Танчук В.Н.	33
Импульсная плазменная установка МК-200 для экспериментального моделирования переходных процессов в ИТЭР	
А.В. Пушина, Д.А. Топорков, Д.А. Бурмистров, В.А. Костюшин, С.Д. Лиджигорьев, Р.Р. Усманов, К.В. Журавлев, А.А. Жарова, С.В. Карелов, И.М. Позняк, В.Ю. Цыбенко, Е.Д. Федулаев, З.И. Новоселова	34
Бенчмарк-эксперимент измерения ослабления нейтронного потока конструкционными материалами ИТЭР с помощью нейтронных спектрометров	
Д.С. Фридрихсен, Т.М. Кормилицын, С.Ю. Обудовский, А.О. Ковалев, Ю.А. Кащук.....	36
Влияние магнитных островов на траектории движения заряженных частиц в токамаке	
Д.Р. Абдувалеев, В.Ю. Савин	37
Разработка системы магнитной изоляции источника плазмы диагностического инжектора токамака Т-15МД	
М.У. Ильясов.....	39
Моделирование эффекта гало с использованием кодов SOS и FIDASIM для активной спектроскопической диагностики на установке ИТЭР	
Г.С. Павлова, С.В. Серов, С.Н. Тугаринов	41
In-situ методика исследования напряжений в вольфрамовой пластине, возникающих в результате термического удара	
Д.Е. Черепанов, А.С. Аракчеев, А.В. Бурдаков, И.В. Кандауров, А.А. Касатов, В.А. Попов, А.А. Руктуев, А.А. Васильев, Л.Н. Вячеславов	42
Исследование термической деформации пластин при импульсном нагреве	
Н. В. Давыдов, А. С. Аракчеев, А.А. Васильев, Л.Н. Вячеславов, И.В. Кандауров, А.А. Касатов, Д.Е. Черепанов	43
Измерение потенциала плазмы в газодинамической ловушке методом доплеровской спектроскопии	
А.В. Сандомирский, А.А. Лизунов	44

Моделирование отклика алмазных детекторов в смешанном поле нейтронов и гамма-квантов	
П.А. Ревякин, Д.А. Кумпилов, Р.Н. Родионов, С.А. Мещанинов, Т.М. Кормилицын, Г.Е. Немцев	45
Влияние плотности газовой завесы на экранирование вольфрамовой мишени при воздействии на неё мощного потока водородной плазмы	
С.Д. Лиджигоряев, Д.А. Топорков, В.В. Гаврилов, И.М. Позняк, В.А. Костюшин, Д.А. Бурмистров, А.В. Пушина.....	46
Модификация поверхности вольфрама при его облучении импульсными потоками дейтериевой плазмы с примесью инертных газов	
А.А. Сергеечев, Д.В. Коваленко, К.М. Гуторов, В.А. Барсук, С.Е. Панин, М.В.Петраков	47
Диагностический комплекс для измерения нейтронного излучения термоядерной DD плазмы на установке МК-200	
А.А. Жарова, Д.А. Топорков, В.А. Костюшин, И.М. Позняк, С.Д. Лиджигоряев, Д.А. Бурмистров....	49
Динамика процесса модификации рельефа металлического образца под действием фотонного нагрева	
М.В. Петраков, А.А. Карташева, Д.В. Коваленко, А.А. Сергеечев, В.Л. Подковыров, К.М. Гуторов..	51
Синтез среднетемпературных термоэлектрических материалов на основе силицидов магния	
А.А. Рожина.....	52
Исследование свойств и микроструктуры образцов, полученных методом селективного лазерного плавления	
В.В. Рузанов, П.Ю. Пискарев, А.Ю. Огурский, С.В. Бобров, А.А. Герваш, М.С. Колесник.....	52
СЕКЦИЯ «ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И КОСМОЛОГИЯ».....	53
Анализ влияния вклада аннигиляционных диаграмм и вклада больших расстояний на распад $B^+ \rightarrow \pi^+ l^+ l^-$	
А.Я. Пархоменко, И.М. Парнова.....	53
Спектаторная материя в столкновениях релятивистских деформированных ядер	
Н.А. Козырев, А.О. Светличный, Р.С. Непейвода, И.А. Пшеничнов	55
Увеличение времени спиновой когерентности в кольце-прототипе для измерения электрического дипольного момента протонов	
А.А. Мельников, Ю.В. Сеничев, А.Е. Аксентьев	57
Оценка чувствительности эксперимента NA62 (ЦЕРН) к поиску тяжёлых нейтрино в распадах заряженных пионов	
К.Ю. Горшанов	57
Исследование поляризационных состояний, запутанных и декогерентных аннигиляционных фотонов	
А.О. Стрижак, Д.С. Борисенко	58
Моделирование трансмутации ядер свинца в ультрапериферических столкновениях на LHC	
У.А. Дмитриева, И.А. Пшеничнов	60
Анализ ассоциативного рождения заряженного В-мезона и состояний чармония и боттомия в эксперименте CMS	
А.Г. Сахарова	62
Вклад релятивистской обратной связи в динамику лавин релятивистских убегающих электронов в сложных грозовых электрических структурах	
Стадничук Е.М.....	63

Матрица переизлучения в реакторной модели лавин убегающих электронов	
Э.С. Ким, Д.И. Землянская, Е.М. Стадничук	65
Изучение регистрации частиц легкой тёмной материи в ближнем детекторе нейтринного эксперимента T2K	
А.С. Шварцман.....	67
Процедура отбора событий $e^+e^- \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$ и проверка корректности процедуры ISR-коррекции на Монте-Карло данных на энергии 2.125 ГэВ	
П.А. Егоров, Ю.А. Нефёдов.....	68
Кластеризация спектаторной материи в столкновениях релятивистских ядер	
Р.С. Непейвода, А.О. Светличный, Н.А. Козырев, И.А. Пшеничнов	70
Получение сигнала В-мезона в распаде $B^0 \rightarrow J/\psi\phi K_s^0$ на данных 2016–2018 годов эксперимента CMS и изучение характерных величин распада	
Д.М. Сокол	71
Критерий бесконечной гамма обратной связи в модели Дваера	
А.С. Седельников, Д.И. Землянская, Е.М. Стадничук	73
Возрастание тяжелых нуклидов в воздухе во время снегопадов	
А.А. Лагуткина, Ю.В. Стенькин.....	74
Поиск частиц темной материи в эксперименте ATLAS на LHC	
Д. Пуджа	75
Прецизионное измерение спектра поперечного импульса p_T^l ($l = e, \mu$) и угловой переменной ϕ_η^* в процессе распада Z-бозона на лептонную пару в эксперименте ATLAS	
А.Е. Ежилов.....	77
Разработка сервиса REST API и пользовательского интерфейса системы метаданных физических событий для экспериментов проекта NICA	
А.Г. Дегтярев, К.В. Герценбергер, П.А. Климай, А.В. Мацейко, А.Ю. Леонов	79
Моделирование экспериментальной установки по исследованию Комптоновского рассеяния запутанных и декогерентных аннигиляционных фотонов	
С.А. Мусин	81
Дипольная поляризуемость дважды магических ядер	
Н.Е. Солонович	83
Разработка метода обработки данных эксперимента Baikal-GVD [1, 2] с применением нейронных сетей	
А.В. Мацейко, А.Ю. Леонов	84
Направленное наблюдение частиц Тёмной материи в детекторе с жидким и газообразным аргоном	
И.Д. Видулин, Гуляева В.В., А.М. Анохина	85
Применение машинного обучения для анализа данных о Σ^0 гипероне	
С.А. Солохин.....	87
Поиск тяжелых нейтральных лептонов при различных фоновых событиях в эксперименте SHiP	
Э.Д. Урсов, А.М. Анохина	87

О возможности исследования образования чармония в эксперименте ALICE3 на Большом адронном коллайдере	
А.М. Варламов, Ю.В. Харлов	89
Реконструкция треков заряженных частиц в прототипе нейтринного детектора SuperFGD в магнитном поле	
А.Е. Дергачева, А.Н. Хотянцев.....	91
Астрофизические исследования на детекторе большого объема LVD (Италия, Гран Сассо)	
Н.Ю. Агафонова, Н. А. Филимонова	92
Обнаружение нового возбужденного $\Xi b(6100)$ – бариона в распаде на $\Xi b - \pi + \pi -$ в эксперименте CMS	
К.М. Иванов.....	93
Влияние энергии первичного электрона на развитие лавин релятивистских убегающих электронов	
Д.И. Землянская, Е.М. Стадничук.....	95
Исследование линейности отклика фотоэлектронных умножителей детектора ДАНСС	
Д.А. Бородулина	96
СЕКЦИЯ БИОФИЗИКИ	99
ДНК-наносенсор на основе магнитных наночастиц для обнаружения и генотипирования <i>Mycobacterium tuberculosis</i> при температурах окружающей среды	
Д.А.Горбенко, М.Ю.Березовская, М.С. Рубель, Д.М. Колпашиков.....	99
Исследование олигомеризации мембранных белков методом локализационной микроскопии одиночных молекул	
Е.И. Бесценная, И.В. Маслов, А.Н. Юденко, Т. Генш, В.И. Борщевский	100
Исследование фотофизических свойств рецептора, сопряженного с G-белком, при помощи сольватохромных красителей на основе хромофора GFP	
А.С. Белоусов, И.А. Маслов, П.А. Хорн, А.С. Мишин, М.С Баранов, В.И. Борщевский.....	101
Структурное исследование неканонической мономерной трансаминазы из <i>Desulfobacula toluolica</i>	
И.О. Матюта, А.К. Бакунова, Николаева А.Ю, К.М. Бойко	102
Микромасштабный термофорез в исследовании взаимодействия микобактериальных цитохромов P450 с азольными соединениями	
И.А. Капранов, М.А. Карпова, Ю.А. Загрядская, И.С. Охрименко, Т.С. Варакса, А.А. Гилеп, Н.В. Струшкевич, В.И. Борщевский1	103
Метод микромасштабного термофореза в исследовании лиганд-белковых взаимодействий GPCR-рецепторов	
Д.Е. Дашевский, А.П. Лугинина, П.А. Хорн, В.С. Шаульская, Л.М.Василенко, А.В. Мишин.....	104
Связывание иона натрия в рецепторах CysLT ₁ R и CysLT ₂ R класса GPCR	
В.С. Шаульская, Э.Ф. Кот, А.П. Лугинина, П.А. Хорн, В.И. Борщевский, К.С. Минеев, А.В. Мишин.....	104
Исследование расщепления белкового комплекса NpSRII/NpHtrII	
Д.Д. Куклина, Ю.Л. Рижиков, М.И. Рулёв, А.И. Куклин, В.И. Горделий.....	105
Исследование бактериальных сенсоров оксида азота семейства FIST	
Е.А. Кузнецова, А.Н. Юденко, И.Ю. Гуцин.....	106

Новые мембрано-моделирующие системы и их применение в исследованиях структуры рецепторов, сопряженных с G-белком, с помощью криоэлектронной микроскопии	
Л.М. Василенко, П.А. Хорн, Е.А. Маркеева, А.В. Мишин	107
Оптимизация метода получения каркасного белка для сборки нанодисков с GPCRs	
Е.А. Маркеева, Л.М. Василенко, П.А. Хорн, Мишин А.В.	108
Создание точечных мутаций для функциональных тестов липидного рецептора GPCR nrg-1	
Н. С. Добрынин, Е. А. Ляпина, А. В. Мишин	109
Классификация липид-ионных взаимодействий по данным малоуглового рассеяния нейтронов, денситометрии и ядерного магнитного резонанса	
С.А. Куракин, Е.В. Ермакова, А.И. Иваньков, Н. Кучерка.....	110
Направленная экспрессия новых родопсинов в митохондриях: сравнение эффективности различных сигнальных последовательностей	
Д.Ф. Багаева, А.Д. Власова, С.М. Бухалович, А.И. Куклин, В.И. Горделий	111
Использование высокоаффинных антител для исследований структуры GPCR-рецепторов методом криоэлектронной микроскопии	
Д.А. Якубенко, Т.В. Котова, М.Б. Шевцов, А.В. Мишин	112
Создание палитры генетически кодируемых флюоресцентных меток для микроскопии в анаэробных условиях	
А.С. Николаев, А.Н. Юденко, И.Ю. Гущин	113
Virtual screening of G-protein coupled receptors in structure-based drug design pipeline	
М. Kovaleva, E. Marin, E. Lyapina, A. Gusach, A. Mishin, A. Rogachev, V. Cherezov, V. Borshchevskiy.....	114
Применение оптогенетической системы защелачивания лизосом для регулирования биологических процессов в клетке	
А.В. Мельников, В.А. Борисов, Н.С. Ильинский, Ф.М. Цыбров, С.М. Бухалович, А.Д. Власова, В.И. Горделий.....	115
Circular permutation of thermostable flavin-based fluorescent protein from <i>Chloroflexus aggregans</i>	
Iakov Kaiumov, Anna Yudenko, Ivan Gushchin.....	116
Характеризация липидных кубических фаз в условиях меняющейся влажности	
С.Д. Иващенко, Е.О. Шапаренко, А.В. Власов, А.С. Казанцев, Ю.Л. Рижиков, А.И. Куклин, В.И. Горделий	117
Антирестрикционная активность ArdB против EcoR124II	
А.М. Лисаченко, А.А. Кудрявцева, И.В. Манухов	118
Построение иммунного профиля CD4+ Т клеток по данным цитометрии крови	
М.Д. Воронина, Р.И. Атауллаханов	120
Сравнение основных характеристик lux-биосенсоров на основе <i>Bacillus subtilis</i> и биосенсоров на основе <i>Escherichia coli</i>	
У. С. Новоятлова, А.Г. Кессених, И.В. Манухов.....	120
Исследование динамики белковых гранул в человеческих клетках и in vitro	
В.А. Борисов, А.В. Мельников, А.С. Фефилова, К.К. Туроверов, И.М. Кузнецова, Н.С. Ильинский, А.В. Фонин, В.Н. Уверский.....	122

Задание ориентации белков при направленной экспрессии во внутренней мембране митохондрий С.М. Бухалович, А.Д. Власова, Д.Ф. Багаева, С.М. Долотова, Н.С. Ильинский, А.И. Куклин, В.И. Горделий.....	123
Навигация в интраоперационном поле методом спектроскопии диффузного отражения: исследование на оптических фантомах П.С. Церегородцева, К.Е. Буянкин, Б.П. Якимов, Г.С. Будылин, Е.А. Ширшин	124
Диффузный имиджинг с использованием пространственно-структурированного света для навигации в интраоперационном поле К.Е. Буянкин, П.С. Церегородцева, Б.П. Якимов, Г.С. Будылин, Е.А. Ширшин	126
Изучение процесса олигомеризации апоферритина методом негативного контрастирования В.В.Сударев, Ю.Л. Рижиков, А.В.Власов, А.А. Царенко, А.В. Рогачев, В.И. Горделий, А.И. Куклин	127
Исследование влияния микроклиматических условий на рост белковых кристаллов in meso А.С. Казанцев, А.О. Бердникова, Р.О. Асташкин, Д. Братанов, А.И. Куклин, В.И. Горделий	128
Экспрессия, очистка и кристаллизация фрагмента бактериальной гистидин-киназы, содержащего сенсорный, ТМ и НАМР домены О.Ю. Семенов, И.М. Гончаров, В.В. Назаренко, А.А. Ремеева, И.Ю. Гуцин	129
Молекулярные основы спектральной настройки флавин-связывающих флуоресцентных белков со смещением в синий и красный цвета В.В. Назаренко, А.А. Ремеева, А. Богородский, К. Ковалев, В. Борщевский, И.Ю. Гуцин	129
Внутренне неупорядоченные участки в АТФ-синтазах С.Д. Осипов, А.В. Власов, В.Н. Уверский, А.И. Куклин, В.И. Горделий	131
Моделирование методом броуновской динамики зависящих от температуры сборки и разборки тубулиновых микротрубочек И.А. Ельцов, У.В. Ульянов, Д.С. Виноградов, Н. Б. Гудимчук	132
СЕКЦИЯ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ИНФОРМАЦИИ	133
Решение уравнения Пуассона при помощи квантовых алгоритмов и тензорных сетей.....	133
А.А. Мельников, А.И. Пахомчик, М.Р. Перельштейн.....	133
Измерения наблюдаемых в многочастичной системе Л.А. Маркович	135
Вынужденные колебания в открытой динамике квантового гармонического осциллятора А.А. Терманова, С.Н. Филиппов	136
Нахождение минимальной длины тензора квантового процесса для восстановления немарковской динамики с повторяющейся эволюцией Г.Н. Семин, С.Н. Филиппов.....	138
Точная динамика моментов и корреляционных функций для фермионных уравнений ГКСЛ пуассоновского типа Ю.А. Носаль, А.Е. Теретёнков	139
Метод GRAPE для открытых квантовых систем, находящихся под воздействием когерентного и некогерентного управлений В.Н. Петруханов, А.Н. Печень	140

СЕКЦИЯ КОСМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ И СОВРЕМЕННОЙ АСТРОФИЗИКИ	142
Эффекты сжимаемости в волновых процессах во вращающейся астрофизической плазме в неупругом приближении	
М.А. Федотова, А.С. Петросян	142
Модель образования неравновесного химического состава в оболочках одиночных нейтронных звёзд	
А.Ю. Игнатовский, Г.С.Бисноватый-Коган	143
Локализованные пылевые звуковые волновые структуры в запыленной магнитосфере Сатурна	
Д.В. Шохрин, С.И. Копнин, С.И. Попель	145
Моделирование поляризованной структуры релятивистских выбросов квазаров	
Р.В. Тодоров, Е.В. Кравченко, И.Н. Пашенко	147
Эволюция необычного квазара 0858-279 с пиковой формой радиоспектра на парсековых масштабах	
Н.А. Косоголов, Ю.Ю. Ковалев	148
Метод Тремейна–Вайнберга: насколько мы можем доверять газовым индикаторам спиральной структуры?	
О.И. Бородина, Т. Уильямс	149
К вопросу о влиянии заряженных частиц диоксида углерода на свойства ионосферы Марса	
Ю.С. Резниченко , А. Ю. Дубинский , Ю. Н. Извекова , С. И. Попель	151
Эффективная параметризация поглощения УФ-излучения в атмосфере Венеры	
М.В. Разумовский, Б.А. Фомин А.В. Родин	152
Исследование фона детектора SPI-ACS космической обсерватории INTEGRAL	
Г.Ю. Мозгунов, А.С. Позаненко, П.Ю. Минаев, И. В. Человеков, С.А. Гребенев	153
Самосогласованное описание резонансного взаимодействия электронов с сигналом наземного ОНЧ-передатчика	
А.А. Лужковский, Д.Р. Шкляр	155
Воспроизведение перехода от одногорбого к двугорбому профилю интенсивности излучения в 3С 273	
В.А. Фролова, Е.Е. Нохрина	157
Топологические свойства спектрального тензора несжимаемого турбулентного сдвигового течения	
С.И. Сафонов, А.С. Петросян	158
Резонансное взаимодействие волн магнито-Пуанкаре в астрофизической плазме в приближении мелкой воды	
Д.А. Климачков, А.С. Петросян	160
Проектирование и разработка фреймворка валидации моделей <i>D</i> -области ионосферы Земли	
Д.А. Сакаев, Е.М. Швец	161
Тени черных дыр и кротовых нор: сходства и отличия	
М.А. Бугаев, И.Д. Новиков, С.В. Репин, А.А. Шелковникова	162
Магнитные поля радиопульсаров	
Д.С.Загоруля, А.Ю.Истомин, В.С.Бескин	164
Study the trajectory of dust particles by simulating the plasma environment on the Moon's surface	
М.Е. Abdelaal, I.A. Shashkova, A.Y. Poroykov , I.A. Kuznetsov, G.G. Dolnikov, A.A. Kartasheva, A. Shekhovtsova, A. S. Bychkova, A. N. Lyash, A. E. Dubov and A. V. Zakharov	166

Численное моделирование транспорта частиц в дисковых моделях	
Е.А. Семенюк , А.С. Петросян	167
Влияние крупномасштабной сжимаемости на нелинейную динамику волн во вращающихся течениях мелкой воды	
М.А. Юденкова, Д.А. Климачков, А.С. Петросян	170
Численное моделирование устойчиво стратифицированной турбулентности в физике планет	
О. П. Воробьев, А. С. Петросян.....	171
Перенос излучения в сильно замагниченной плазме	
Т.А. Пухов, Д.А. Румянцев	171
Использование управляемых летательных аппаратов для калибровок установок, регистрирующих черенковский свет от ШАЛ	
Д.М. Воронин	173
Баксанский большой нейтринный телескоп: текущий статус	
Н.А. Ушаков	174
Сравнение алгоритмов восстановления интерферометрических изображений по инфракрасным данным с прибора MATISSE	
Н.С. Никонова, П.Э. Боли	175
Проектирование системы компенсации магнитного поля для прототипа Большого Баксанского нейтринного телескопа	
А.Д. Луканов	176
Идентификация тепловых нейтронов с применением машинного обучения в эксперименте ENDA	
К.О. Куринов	177
Вероятностное распределение звезд в Галактике по спектральным классам	
В.А. Муха, П.Э. Боли.....	177
Нелинейные преобразования кинетической и магнитной энергий в двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на бета-плоскости	
Т.А. Зиняков, А.С. Петросян	178
СЕКЦИЯ ЛАЗЕРНЫХ СИСТЕМ И СТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ.....	180
Особенности анизотропии магнетосопротивления в редкоземельных додекаборидах RB_{12} ($R=Ho, Er, Tm$) с динамическими зарядовыми страйпами	
К.М. Красиков*, А.Н. Азаревич, В.В. Глушков, С.В. Демишев, А.В. Богач, Н.Ю. Шицевалова, В.Б. Филиппов, Н.Е. Случанко	180
Магнитные и магнитоэлектрические свойства тройной спиральной магнитной структуры на примере Fe-лангаситов	
А.Ю. Тихановский, А.А. Мухин, В.Ю. Иванов, А.М. Кузьменко	181
Синтез и оптические свойства 3-А-графеновых нанополос	
И.В. Новиков, П.В. Федотов, Д.В. Рыбковский, Е.Д. Образцова.....	183
СЕКЦИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ И ЯДЕРНЫХ ПРОЦЕССОВ.....	185
Асимптотическое обоснование эффекта перехлеста в сильно диспергированной смеси газов	
М.М. Кузнецов, Ю.Д. Кулешова	185
Перехлест средней продольной кинетической температуры в ударно сжатой бинарной смеси газов	

И.В. Демидов, М.М. Кузнецов, Ю.Д. Кулешова, Д.Ю. Сатюков, Смирнова А.С.	186
Исследования образования ЦО и устойчивости к ИИ простых и смешанных кристаллов флюорита	
С.Э.Саркисов, В.А.Юсим, С.М. Голуб	187
Изучение воздействия ИИ и влияния среды термообработки на образование ЦО в кристаллах флюорита и иттрофлюорита	
Саркисов С.Э., Клосс Ю.Ю., Юсим В.А., Сметанин М.Ю.	188
Численное моделирование состояний тепловой системы в процессе синтеза монокристаллов фторидов метода ГНК с использованием различных ростовых тиглей	
В.А. Юсим, С.Э. Саркисов, Д.О. Михайлов, Р.К. Калимуллин, Ф.А. Юсим	189
Simulation of the neutron sources in a gneiss tunnel	
Ю.М. Гаврилюк, А.М. Гангапшев, А.М. Гежаев, В.В. Казалов, С.П. Якименко.....	191
Моделирование истечения газа через отверстие с круглым сечением	
Е.О Комаров, Ю.Ю. Клосс, Ф.Г. Черемисин.....	196
Компьютерное моделирование разделения смеси газов на основе многотрубчатого микронасоса Кнудсена	
И.В. Говорун, Т.А. Сазыкина, Ю.В. Широковская	198
Разработка вычислительных алгоритмов и программных солверов для анализа свободномолекулярного течения газа	
Юсим В.А., Широковская Ю.В., Сакмаров А.В.	200
Исследование неравновесных газокинетических процессов на основе компьютерных моделей ударных волн в микроканалах	
А.А. Бабайлов, И.В. Говорун, Т.А. Сазыкина.....	202
Моделирование и исследование трещиноватых геологических структур	
Н.Ю. Романенко, Н.И. Хохлов, Ю.Ю. Клосс	203
СЕКЦИЯ НАНООПТИКИ И СПЕКТРОСКОПИИ.....	206
Квантовая электронная плазма, плазмонные резонансы и толщина тонкой металлической пленки	
Н.В. Зверев, А.А. Зотов	206
Трехмерная флуоресцентная DHPSF-наноскопия коллоидных полупроводниковых нанокристаллов (квантовых точек)	
И.Ю. Еремчев, Д.В. Прокопова, Н.Н. Лосевский, И.Т. Мынжасаров, С.П. Котова, А.В. Наумов	208
Численное моделирование влияния малых вариаций толщин слоёв на спектры отражения многослойных зеркал мягкого рентгеновского диапазона	
Е. В. Носач, Е. А. Вишняков, А. О. Колесников, А. Н. Шатохин, Е. Н. Рагозин.....	209
Определение средней длины свободного пробега между актами неупругого рассеяния методами квантовой теории поля	
Базулин И.А.,Виноградова А.В.,Коньков А.А., Рогозин К.А.,Мязин А.С.	211
Исследование влияния электрон-фононного взаимодействия на фотолюминесценцию GeV центров в алмазе в температурной области 20–180 К	
А.А. Разгулов, С.Г. Ляпин, А.П. Новиков, Е.А Екимов	213
ГКР-активные подложки из декорированных золотом кремниевых нанонитей для безметочного обнаружения билирубина	

А.Д. Карташова, Е.А. Алексеева, И. В. Божьев, М.Б. Гонгальский, К.А. Гончар, Ж.В. Самсонова, Л.А. Осминкина	214
Исследование фотофизических свойств одиночных нанокристаллов перовскита Cs ₄ PbBr ₆	
И.А. Муканов, И.Ю. Еремчев, А.О. Тарасевич, А.Г. Сон, Е.В. Текшина, А.А. Егорова, Н.А. Короткова, С.А. Козюхин, А.В. Наумов, И.Г. Щеблыкин	216
Плеэкситонная связь в смесях квантовых точек CdS и наночастиц серебра	
В.Н. Дерепко, О.В. Овчинников, М.С. Смирнов	217
Исследование влияния центрального иона на фотолюминесцентные свойства координационных соединений с лигандом из класса 1,3-дикетонов	
Поликовский Т.А., Коршунов В.М, Тайдаков И.В.....	219
Квантовая сенсорика на основе холодных атомов	
А.Е. Афанасьев, А.С. Калмыков, Р.В. Киртаев, А.А. Кортель, П.И. Скакуненко, Д.В. Быкова, Д.В. Негров, В.И. Балыкин	221
Исследование взаимосвязи оптических свойств и гетерогенности системы, обладающей автофлуоресценцией в красной/ БИК области спектра, с использованием оптических методов	
А. Хасан, Н.Р. Ровнягина, А.А. Рубекина, Г.О. Силаев, Б.П. Якимов, Ю.Г. Вайнер, Е.А. Ширшин ..	222
Исследование сверхтонких и деформационных расщеплений в спектрах поглощения кристаллов YVO ₄ -Ho ³⁺	
Т.А. Иголкина, Е.П. Чукалина, С.А. Климин.....	223
Влияние типа радикала на фотофизические и люминесцентные свойства новых органических лигандов из класса 1,3-дикетонов	
С.Р. Заниздра, М.Т. Метлин, В.М. Коршунов, И.В. Тайдаков	225
Исследование микроструктуры лазерной керамики на основе Yb:YAG, Yb:LuAG, Pr:LuAG– возможности методов	
К.Н. Белов, Л.И. Дёмина, Д.А.Жеребцов, М.Г. Иванов, Н.Д. Кундикова	227
Нанопериодические оптические сенсоры с гигантским усилением Рамановского рассеяния света при ИК-возбуждении	
А.С. Астраханцева, И.В. Кукушкин.....	229
Оптическая микроскопия и спектроскопия наночастиц LaF ₃ , допированных ионами Nd ⁺ , в водных средах	
Г.О. Силаев, Орловский Ю.В., Ф.В. Верещагин, Ю.Г. Вайнер.....	230
СЕКЦИЯ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ	232
Разработка технологий оружия направленной энергии за рубежом	
А.В. Кубышкин, И.Н. Белоконь	232
Гамма-резонансный спектрометр на наклонном канале реактора ПИК	
М.В. Ремизов, Д.И. Богмут, В.Т.Лебедев	233
Определение эффективности процесса нагрева воды экспериментальным методом	
И.А. Щинников	234
Ионный насос	
А. Н. Синельников.....	236
Система стабилизации температуры, основанная на эффекте Пельтье	
А.С. Стрельников, Н.С. Пилюгин, Е.Д. Муханова, Д.О. Устимчук.....	237

Динамика распространения фронта сжатия при объемной детонации гомогенной стехиометрической смеси горючее – окислитель	
М.В. Царьков, В.Ю. Стожков	239
Эффект Кэя как частный случай проявления свойств неньютоновских жидкостей	
Д.Е. Вовк, И.М. Мазуренко.....	241
Трактовка случайных и систематических ошибок измерений в научных исследованиях	
К.Н. Белов, Ю.В. Мухин, Н.Д. Кундикова	242
Моделирование траекторий ускоренных электронов в плазменных ускорителях	
В. С. Захарова.....	244
Исследование деформации капли ферромагнитной жидкости в магнитом поле	
Е.С. Зворыгина.....	245
Лазерная передача информации и система «прослушки»	
С.В. Колесников, Г.Г. Адамян	245
СЕКЦИЯ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ.....	247
Решение двумерной задачи поиска стационарного распределения температуры стержневого твэла с несимметричным положением топливной таблетки	
А.П. Долгодворов	247
Микроскопическая модель миграции жидкого включения в поле постоянного градиента температуры	
А.Р. Аветисян, О.О. Корчагина, Л.В. Матвеев.....	248
Расчётный анализ неопределённости последствий тяжёлой аварии с полным обесточиванием АЭС с ВВЭР-1000	
Н.Д. Гембицкий, К.С. Долганов	250
Синтез сложных оксидных композиций для уран-ториевого ядерного топлива в неравновесной плазме факельного разряда	
А.Е. Тихонов, И.Ю. Новоселов	252
Классическая диффузия в анизотропной среде с крупномасштабными неоднородностями	
Кондратенко П.С., Матвеев А.Л., Обухов Ю.Н.	253
Технология очищения воды от опасных радионуклидов с применением сорбционных технологий по аналогии с «урановым производством» с концептуальным предложением применением модульно-одноразовых кассет с БСРП	
М.Ж. Буленбаев, А.Т. Хабиев, Б.Т. Алтайбаев, Е.А. Кожамсугиров.....	254
Радиационное обследование здания реактора МР на соответствие конечному состоянию проекта вывода из эксплуатации	
В.М. Вершинин, Е.А. Степанов, К.Ю. Козаков	255
Плазмохимический синтез и исследование наноразмерных оксидных композиций, моделирующих дисперсионное gemix-топливо	
С.Ю. Кузнецов	256
Влияние внешних динамических сил на процесс естественной циркуляции в судовой ядерной энергетической установке	
А.М. Самойлов, А.А. Сатаев, А.А. Блохин, В.В. Андреев.....	257
Определение критического размера линзовидной поры для её движения по механизму испарение-конденсация	

П.А. Аверченко, М.В. Хорохорин, О.В. Хоружий	259
Исследование моделей влажного осаждения аэрозолей, возникающего при радиоактивном выбросе в атмосферу	
А.С. Осадчий	259
Применение методов комбинаторной оптимизации в области обращения с РАО	
Д.Д. Шишкина, С. Т. Казиева	261
Проблемные аспекты применения газовой системы компенсации объема в ядерной энергетической установке	
Д.И. Новиков, А.А. Сатаев, А.М. Самойлов, В.И. Полуничев	263
СЕКЦИЯ ПРОБЛЕМ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ, ЭЛЕКТРОФИЗИКИ, КВАНТОВОЙ РАДИОФИЗИКИ И ПРОБЛЕМ ФИЗИКИ И АСТРОФИЗИКИ	265
Выбор оптимального типа пассивирующего лиганда для фотодетекторов инфракрасного диапазона на основе коллоидных нанокристаллов HgSe	
Д. Соколова, А.В. Кацаба, С.А. Амброзевич, В.Ф.Разумов.....	265
Оценка пространственной когерентности рентгеновского лазера SACLA дифракционным методом	
Д. Х. Панэке Агилера, И. А. Артюков	266
Временные характеристики ВКР в комбинационно-активных порошковых средах	
А.Н. Маресев, М.А.Шевченко, С.Ф. Уманская, Н.В.Чернега.....	268
Решение проблемы поиска собственных значений для изучения диокотронной неустойчивости в гиротронах	
В. С. Захарова.....	270
Оптимизация загрузки атомов в магнитно-оптическую ловушку с использованием методов машинного обучения	
Е.М. Агапов, М.О. Яушев А.А. Головизин	271
Создание системы управления установкой компактных оптических часов	
М.О. Яушев, Е.М. Агапов	271
Измерение энергии активации метано-воздушных смесей методом тонковолоконной пирометрии	
А.Д. Морошкина, В.В. Губернов, В.В. Миславский, Т.П. Мирошниченко	272
Обобщение формулы квазистатического приближения для дипольной поляризуемости наночастиц	
А. В. Мекшун, А. Д. Кондорский	274
Нелинейность импульсной катодолюминесценции кристалла LFS-3	
М.В. Белов, Ю.Д. Заварцев, М.В. Завертяев, А.И. Загуменный, В.А. Козлов, С.А. Кутовой, Н.В. Пестовский, С. Ю. Савинов, Д. М. Тажитдинов, О. С. Шляхтун	275
Угловая направленность различных спектральных компонент терагерцового излучения, генерируемого в плазме одноцветного филамента	
Г.Э. Ризаев, Д.В. Мокроусова, Л.В. Селезнев, А.А. Ионин	276
Модель для описания нелинейно-оптического отклика J-агрегата PIC на лазерные импульсы разной продолжительности	
С.С. Моритака, А.Д. Кондорский, В.С. Лебедев	277
Оптимизация линейной оптики коллайдера ВЭПП-4М	
Р.З. Мамутов.....	280
Двухкомпонентные слоевые нанопроволоки с управляемой агломерацией для SERS-спектроскопии	

Е.П. Кожина, С.А. Бедин.....	282
СЕКЦИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ, НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР И КВАНТОВЫХ МАТЕРИАЛОВ	284
Определение сверхпроводящих параметров порядка слабо передопированных пниктидов BaFe _{1.88} Ni _{0.12} As ₂ методом SnS-андреевской спектроскопии	
В.М. Михайлов, С.А. Кузьмичев, К.С. Перваков, В.А. Власенко, Т.Е. Кузьмичева.....	284
Линейное магнетосопротивление и транспортные параметры поликристаллов (Cd _{1-x} Mn _x) ₃ As ₂	
Ф.С. Зуй, Л.Н. Овешников, А.И. Риль, Б.А. Аронзон	285
Исследование эффекта Холла в планарных микроструктурах из топологического изолятора Bi _{1.08} Sb _{0.9} Sn _{0.02} Te ₂ S	
А.Э. Борисов, Л.А. Моргун.....	287
Зонная структура топологического изолятора Bi _{1.08} Sn _{0.02} Sb _{0.9} Te ₂ S, допированного ванадием	
К.А. Дмитриева, П.И. Безотосный, А.Г. Рыбкин, Г.Б. Тейтельбаум, В.М. Пудалов.....	288
Исследование свойств многотерминального джозефсоновского контакта	
А.Ф. Посадский.....	290
Микромасочная экспресс-фотолитография для работы с чешуйками 2D-материалов	
М.В. Пугачев, А.И. Дулебо, А.А. Галиуллин, А.Ю. Кунцевич	291
Оптическая спектроскопия пленки BaFe _{1.91} Ni _{0.09} As ₂	
А.В. Муратов, Ю.А. Алещенко	292
Сверхпроводимость нанокompозита Bi-Sn / пористое стекло	
М.В. Лихолетова, Е.В. Чарная.....	293
Визуализация неоднородного проникновения магнитного поля при обрыве экранирующего тока в импульсно намагниченном YBCO кольце	
П.А. Бражник, Е.П. Красноперов	293
Исследование нового интерметаллического сверхпроводника Mo ₄ Ga ₂₀ Sb методом ЯМР- спектроскопии	
Д.А. Ярыгина, С.В. Журенко, А.В. Ткачев, А.В. Гунбин, В.Ю. Верченко, А.А. Гиппиус	295
Температурная и размерная зависимость поля необратимости слоистого высокотемпературного сверхпроводника с дефектами	
А.А. Михайлов, М.М. Мартьянов, А.Н. Мороз, А.Н. Максимова	297
Структура и свойства магнитного сверхпроводника Eu-1144	
А.Ю. Дегтяренко, В.А. Власенко, И.А. Каратеев, А.В. Овчаров, К.С. Перваков	298
Сверхпроводящий соленоид из ВТСП ленты второго поколения	
В.Г. Франц, Н.Н. Балашов, А.Ю. Дегтяренко, П.Н. Дегтяренко, В.В. Желтов, К.Л. Ковалев	299
СЕКЦИЯ СОВРЕМЕННЫХ ПРОБЛЕМ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ	301
Латеральный эффект Джозефсона на поверхности магнитного вейлевского полуметалла Co ₃ Sn ₂ S ₂	
О.О. Швецов, В.Д. Есин, Ю.С. Бараш, А.В. Тимонина, Н.Н. Колесников, Э.В. Девятков.....	301
Проводимость и термоэлектрические коэффициенты допированного титаната стронция при высоких температурах	
Х.Г. Назарян, М.В. Фейгельман	301

Механическое отшелушивание двумерных кристаллов на примере WSe ₂ и графена	
А.И. Дулебо, М. В. Пугачев, М. А. Акмаев, А. Ю. Кунцевич	303
Взаимодействие неелевского скирмиона и пирловского вихря	
Е.С. Андрияхина, И.С.Бурмистров	304
Волны в двумерном когерентном вихре	
Н.А. Ивченко, С.С. Вергелес	306
СЕКЦИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ	308
Рождение частиц в игрушечной O(N) модели	
Д.А. Трунин	308
Анализ σ – когомологии для симметричных полей высших спинов	
А.С. Бычков, К.А. Ушаков, М.А. Васильев	309
Неабелева фермионная T-дуальность в супергравитации	
Л. Н. Астраханцев, Э. Т. Мусаев, И. В. Бахматов.....	310
Инфракрасные петлевые поправки в расширяющейся Вселенной	
П.А. Анемподистов.....	310
Узлы в электродинамике	
АЮ. Морозов, Н.С. Целоусов.....	311
О бигармонических поправках к уравнению Навье–Стокса	
Зо Аунг, С.О. Гладков	312
Топологические квантовые числа для двухэлектронных состояний в кристалле. Применение к триплетному сверхпроводнику UPt ₃	
Е.А. Тепляков, В.Г. Яржемский	316
Когомологии σ_- -комплекса для полей высших спинов в AdS (4)	
А.С. Бычков, К.А. Ушаков, М.А. Васильев.....	317
Связь операторов разрезания-склейки и операторов Казимира	
А.А. Жабин, А.Д. Миронов, А.Ю. Морозов.....	318
Уравнение состояния кварковой материи при конечных температуре и плотности кварков в рамках модели Намбу–Иона-Лазинио	
В.В. КорниенкоЮ.Л. КалиновскийА.В. Фризен.....	319
Обобщение цифрового представления непрерывных наблюдаемых в квантовой механике на случай произвольной системы счисления	
М.Г. Иванов, А.Ю. Полушкин.....	320
Спектр масс псевдоскалярных мезонов в нелокальной эффективной модели КХД	
Э.Ф. Мурзин	322
Заметка об особенностях квантовых полей в пространствах с горизонтами	
К.В. Базаров.....	323
От КХД к эффективным теориям: адронизация	
Д.Д. Шелковкин	324
Вариационный принцип в динамике развёрнутых уравнений	
М.А. Васильев А.А. Тарусов	325

Обобщение 2d-гравитации А.М. Полякова на случаи с простейшими неинвариантными состояниями Д.И. Садеков.....	325
Пространственно-подобные инстантоны в голографической КХД К.И. Измайлов, А.С. Горский	327
Идентификация дискретных уравнений Пенлеве Е.С. Трунина.....	328
Свободные фоковские парафермионы в модели сильной связи с диссипацией А.С. Мастюкова, Д.В. Курлов, В. Грицев, А.К. Фёдоров	329
Топологические солитоны в скалярных теориях с полиномиальным самодействием А.А. Мальнев, Т. В. Гани, П. А. Блинов	331
Амплитуда распределения лидирующего твиста дважды тяжелого бариона и ее первый обратный момент А.К. Шухтина	333
Экзотические потенциалы и тождества Бьянки в $SL(5)$ исключительной теории поля К.А. Губарев , Э.Т. Мусаев	334
Низкоэнергетическое эффективное действие $N=4$ суперсимметричной теории Янга–Миллса в бигармоническом подходе: члены высших порядков В. А. Ивановский	335
Прологомены ко всякой $N=2$ суперсимметричной теории Васильева Н.М. Заиграев.....	336
СЕКЦИЯ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ПЛОТНОСТЕЙ ЭНЕРГИИ.....	338
Горение в сверхзвуковом потоке с использованием пилона, оборудованного плазменным актуатором Н.С. Колосов, А.А. Фирсов.....	338
Процессы энергетического обмена в двухфракционных системах заряженных пылевых частиц С.В.Кауфман, О.С. Ваулина.....	340
Распределение интенсивности излучения, инициируемого импульсным разрядом по поверхности феррита С.Н. Андреев, А.В. Бернацкий, Г.А. Душкин, С.Н. Цхай, И.Н. Тиликин, С.Ю. Савинов	341
Квантовое молекулярно-динамическое моделирование железа в твердой и жидкой фазах в окрестности плавления И.С. Гальцов, Д.В. Минаков	342
Исследование энергетического распределения ионов диффузного дугового разряда на горячем катоде (SeO_2) в области за анодом с помощью многосеточного анализатора С.Б. Ветрова, Н.Н. Антонов, А.Д. Мельников, Р.А. Усманов, А.В. Гавриков.....	343
Исследования криогенной пылевой плазмы в тлеющем разряде постоянного тока Н.В. Горшунов, Р.Е. Болтнев	345
Расчёт аксиально несимметричного распределения потенциала в цилиндрическом плазменном столбе с термокатодом А.П. Ойлер , Г.Д. Лизякин, А.В. Гавриков	346
Масс-спектрометрический анализ газа, истекающего в вакуум при испарении диоксида церия в молибденовых, танталовых и вольфрамовых тиглях	

Л.С. Волков, Н.Ю. Бабаева, Н.Н. Антонов, А.Д. Мельников, А.В. Гавриков.....	348
Измерение спектров колебаний потенциала плазмы в отражательном разряде с термокатодом	
М.А. Валинуров, А.В. Гавриков, Г.Д. Лизякин, А.П. Ойлер	350
Определение амплитуды нелинейной кильватерной волны, генерируемой в плазме интенсивным фемтосекундным лазерным импульсом	
Ю.Р. Гайничина, Н.Е. Андреев.....	351
Модификация поверхности частиц в плазме емкостного высокочастотного разряда	
Е.А. Кононов, М.М. Васильев, О.Ф. Петров	352
Броуновское движение капель эмульсии сложного состава при воздействии лазерного излучения	
Р.В. Сеношенко, Е.А. Кононов, М.М. Васильев, О.Ф. Петров.....	353
Ионный состав плазмы вакуумной дуги на горячем катоде из CeO_2	
А.Д. Мельников, Р.А. Усманов, В.П. Полищук, Н.Н. Антонов, А.В. Гавриков	354
Колебательное движение капель масла в эмульсии вблизи границы раздела воздух–вода	
В.С. Судаков, О.Ф. Петров, Е.Е. Коршунова	356
Граница двухфазной области жидкость–газ по разным уравнениям состояния	
К.А. Боярских, К.В. Хищенко.....	357
Динамика уединенных янус-частиц в тлеющем разряде постоянного тока при воздействии лазерного излучения	
А.С. Светлов, Е.А. Кононов, О.Ф. Петров, М.М. Васильев.....	359
Высокотемпературные свойства жидкого циркония: первопринципное моделирование и интерпретация экспериментальных данных	
М.А. Парамонов, Д.В. Минаков, П.Р. Левашов	359
Расчет ударных адиабат сплавов металлов при высоких давлениях	
Н.Н. Середкин, К.В. Хищенко	361
Моделирование электрического разряда постоянного тока в воздушном потоке	
Д.А. Тарасов, А.А. Фирсов	361
Особенности взаимодействия пылевых частиц в газовом разряде	
Э.А. Саметов, Е.А. Лисин, Е.А. Кононов, О.С. Ваулина, М.М. Васильев, О.Ф. Петров	363
Структура ударной волны в никеле с наноразмерными порами при 1.7 и 4.1 ГПа	
Т.А. Ростиллов, В.С. Зиборов, А.Ю. Долгобородов, М.Л. Кусков	365
Формирование микрочастиц в плазме тлеющего разряда постоянного тока	
Ефименко Д.Б., Кононов Е.А., Васильев М.М., Петров О.Ф.....	366
Моделирование системы ускоряющих электродов для времяпролетного масс-анализатора	
Д.Е. Миронов, А.Д. Мельников, Р.А. Усманов, А.В. Гавриков	367
Экспериментальное исследование электрических характеристик импульсного поверхностного барьерного разряда	
С.А. Фортальнов, В.В. Воеводин	369
Экспериментальное исследование взаимодействия между янус-частицами в приэлектродном слое ВЧ-разряда	
Е.А. Лисин, Е.А. Кононов, М.М. Васильев, О.Ф. Петров.....	371

Расчет потенциальных кривых межатомного взаимодействия и термодинамических свойств ArN^+ М.А. Мальцев, И.В. Морозов, С.А. Аксенова.....	371
Лазерная рефлектометрия для повышения достоверности измерений истинной температуры полихроматическим пирометром А.С. Булава, А.А. Васин, М.А. Шейндлин	372
СЕКЦИЯ ФИЗИКИ КВАНТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ	374
Fractal states of the Schwinger model E.V. Petrova, E.S. Tiunov, M.C. Banuls, A.K. Fedorov	374
Evolution of the optical qubit Wigner function under dissipation N. Zunikov	375
Polarization control protocol for QKD fiber systems I.S. Gerasin, E.E. Mekhtiev, A.V. Duplinsky	376
Treating the non-local correlations in the 2D Hubbard lattice in the vicinity of the atomic limit Ya.S. Lyakhova, A.N. Rubtsov	377
New scheme of absolute standardless quantum photometry S. Y. Tsavianov, V. V. Zemlyanov, M. V. Lebedev, O.V. Misochko, A.V. Solovyov, G.B Lesovik	379
Trace decoherence measure as a way of errors estimation in quantum computing A.A. Kurkin, L.E. Fedichkin	380
Quantum tomography of states containing large photon numbers E.A. Fedotova, E.S. Tiunov, N.S. Kuznetsov, A.I. Lvovsky.....	382
Parametric Two-qubit Gate for Fluxonium Circuits Ilya N. Moskalenko, Ilya S. Besedin, Ilya A. Simakov, and Alexey V. Ustinov	383
Strongly interacting two-dimensional dipolar Fermi gases V.Y. Pinchenkova, G.V. Shlyapnikov, S.I. Matveenko.....	384
Two-qubit CZ gate using two tunable inductively coupled fluxoniums Grigoriy S. Mazhorin, Ilya N. Moskalenko, Ilya S. Besedin, Alexey V. Ustinov	386
Simulation of Rabi oscillations with cross-damping in three-level Vee system N.D. Korolev, L.A. Akopyan, A.N. Matveev, K.E. Lakhmanskiy	387
Addressing to individual qubits while performing single-qubit operations with single rubidium atoms I. I. Beterov, P. I. Betleni	389
Interference of spin waves excited by a train of fs-laser pulses in YIG A.A. Kolosvetov, M.A. Kozhaev, V. I. Belotelov , A.I. Chernov	390
Photon counting statistics of coherent states for distributed dead time Aleksei Reutov, Denis Sych	391
Efficient error correction for quantum secure networks I. Petrov, N. Borisov, A. Tayduganov	392
Automatic design of multi-qubits systems A. Kazmina, E. Egorova, I. Besedin.....	394
Simulation of ion dynamics in Surface Electrode TraP	

Artem Podlesnyy, Yelnury Suleimen, Kirill Lakhmanskiy	395
Generalized Toffoli gate decomposition on superconducting and trapped-ion-based qutrits	
A.S. Nikolaeva, E.O. Kiktenko, A.K. Fedorov	397
Currents of topological marker in dynamically controlled Chern Insulators	
D.B. Golovanova ¹² , A.R. Yavorsky ¹² , A.A. Markov ¹ , A.N. Rubtsov ¹³	398
4-qubit chip with tunable coupling	
E.U. Egorova, I.A. Tsitsilin, A.S. Kazmina, I.S. Besedin, A.N. Bolgar, D.A. Kalacheva, A.V. Ustinov	400
Classical sympathetic cooling simulation of mixed species trapped ion chains	
Sterligov N.A., Lakhmanskaya O.Y., Akopyan L.A., Lakhmansky K.E.	401
Fluctuating local field method for the Ising model with arbitrary couplings	
Kuznetsova D.V. , Astretsov G.V. , Rubtsov A.N.....	404
Detection of fluorescence from ablated ⁹ Be for future implementation in a Penning trap	
A. Zhuravlev, T. Sägerser, S. Jain, P. Hrmo, J. P. Home	405
СЕКЦИЯ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА	408
Влияние механических напряжений на морфологию и магнитную доменную структуру поверхности соединений Tb _{0,16} Ho _{0,84} Fe _{2-x} Co _x	
A.C. Стречень, Ю.А. Курносов, Г.Г. Дунаева, А.Ю. Карпенков, Е.М. Семенова	408
Возбуждение плазменных осцилляций в системе 2ДЭГ и оценка параметров 2Д-электронной плазмы по данным спектров эмиссии ТГц-излучения	
Е.Р. Бурмистров, Л.П. Авакянц	409
Применение DMFT для исследования роли магнитных корреляций в двумерной модели Хаббарда	
И.А. Горемыки, А.А. Катанин	411
Повышение эффективности фотоэлемента путем пассивации поверхности кремниевых пластин прозрачным проводящим покрытием на основе оксида олова	
Д.О. Мурзалинов.....	413
Исследования электрофизических свойств перфторсульфоновых мембран, модифицированных катионами тербия	
Т.В. Резцов, Н.А. Лапатин	415
Контроль суммарного знака резидентных зарядов в квантовой яме GaAs/AlGaAs	
А.А. Бутюгина, Р.С. Назаров, И.А. Соловьёв, Ю.В. Капитонов	416
Увеличение времени необратимой фазовой релаксации экситонного ансамбля при воздействии непрерывным лазерным излучением в квантовой яме GaAs/AlGaAs	
Р.С. Назаров, И.А. Соловьёв, Ю.В. Капитонов.....	417
Магнитные свойства HoFe _{3-x} Ga _x (BO ₃) ₄	
В.Р. Кучешева-Титова, И.А. Гудим, Е.В. Еремин	419
Исследование протяженных наноструктур, формируемых с помощью электрических и оптических воздействий на конденсированные среды	
П.В. Провоторов, А.А. Левченко, Н.В. Классен	420
Биоразлагаемые гелеобразующие добавки как промоутеры гидратообразования	
Н.С. Молокитина, К.А. Плетнева , А.А. Кибкало, А.О. Драчук.....	422

Структурные и электрофизические свойства пленок WO_x , формируемых импульсным лазерным осаждением для MOSiC сенсоров водорода	
А.А.Соловьев, В.Ю. Фоминский.....	424
Влияние условий поверхностного сульфидирования нанокристаллической пленки WO_3 на ее фотоэлектрокаталитические свойства при получении водорода	
А.А. Трескова, А.А.Соловьев, В.Ю Фоминский.....	426
Практическая реализация сверхпроводящих нейронов	
А.С. Ионин, Л.Н. Карелина, В.В. Больгинов.....	427
Влияние замещения ионов Vi^+ ионами Pb^+ на термоэлектрические свойства $BiCuSeO$	
Д.С. Пашкова.....	428
Резонансное отражение света в лафлиновском состоянии $1/3$	
Е.И. Белозеров, А.С. Журавлев	429
Исследование магнетизма в антиферромагнетике $EuSn_2As_2$	
Е.И. Мальцев, И.А. Головчанский, В.А. Власенко, А.В. Садаков, С.Ю. Гаврилкин, О.А. Соболевский, К.С. Перваков.....	430
Соударение профилированных медных цилиндров с жесткой стенкой: эксперимент и микроструктурный анализ	
Е.С. Родионов, В.Г. Лупанов, Н.А. Грачева, П.Н. Майер, А.Е. Майер	432
Магнитная анизотропия частиц ядро@оболочка	
Шипкова Е.Д., Комлев А.С., Перов Н.С.....	432
Исследование экситонных состояний перовскита $CsPbVg_3:Er_{0.1}$ методами магнитофотолуминесценции и отражения в магнитном поле	
С.Н. Терешко.....	433
Исследование магнитных свойств кристаллических нано- и микропорошков $LiTbF_4$ и магнитных аномалий кристаллического $LiDyF_4$ при низких температурах	
Г.Ю. Андреев, И.В. Романова, С.Л. Кораблева, О.А. Морозов, А.С. Семакин, М.А. Черосов, А.Г. Киямов, М.С. Тагиров	435
Численное моделирование процесса деформации медных ударников	
Грачёва Н.А., Родионов Е.С., Лупанов В.Г., Майер П.Н., Майер А.Е.....	437
Уточнение феноменологической теории фазового перехода первого рода для гидрированных сплавов $La(FeSi)_{13}$	
Макарьин Р.А, Карпенков Д.Ю.	438
Исследование релятивистских плазменных возбуждений в частично экранированных двумерных электронных системах	
А.М. Зарезин, В.М. Муравьев, П.А. Гусихин, И.В. Кукушкин	438
Исследование электромагнитных плазменных волн в двумерных электронных системах	
К.Р. Джикирба, П.А. Гусихин, В.М. Муравьев, И.В. Кукушкин.....	440
СЕКЦИЯ ФОТОНИКИ И ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ.....	442
Послойный анализ металл-оксидных пленок методом РФЭС	
А.В. Виноградова, И.А. Базулин, К.А. Рогозин, А.А. Коньков.....	442
Топологическая темнота в атомарно тонких пленках дихалькогенидов переходных металлов	

Г.А. Ермолаев, К.В. Воронин, Д.Г. Баранов, Д.И. Якубовский, Г.И. Целиков, С.М. Новиков, А.Б. Мазитов, И.А. Круглов, А.А. Вишневы, А.В. Арсенин, В.С. Волков	443
Резонансный оптический отклик квазиупорядоченной системы экситонов в квантовых ям InGaN/GaN	
А.А. Иванов, В.В. Чалдышев	444
3D creation of various microlenses using two-photon photopolymerization	
R. P. Matital, D. A. Chubich, D. A. Kolymagin, A. G. Viktukhnovsky	445
Оценка термодинамических параметров в низкоразмерных магнетиках при низких температурах	
А.К. Нухов	447
Стабильность тонких кристаллов CoPS ₃ при атмосферных условиях	
Ю.А. Клишин, Д.И. Якубовский, М.К. Татмышевский, А.В. Арсенин, Д.А. Казарян, В.С. Волков...	449
Моделирование и исследование параметров наноразмерных оптических волноводов нового типа на основе ван-дер-ваальсовых материалов	
И.С. Харичкин, А.А. Вишневы, К.В. Воронин, Д.В. Грудинин, Г.А. Ермолаев, А.В. Арсенин, В.С. Волков.....	450
Оптимальная асимметрия в детекторах терагерцового излучения, основанных на транзисторах с двумерным каналом	
А. Шабанов, М. Москотин, В. Белосевич, Я. Матюшкин, М. Рыбин, Г. Федоров. Д. Свинцов.....	451
Оптические свойства наночастиц на основе диалькогенидов переходных металлов	
Д.А. Панова, Г.И. Целиков.....	454
Исследование оптических констант диселенида и дисульфида олова методом спектроскопической эллипсометрии	
М.А. Элсайед, Г.А. Ермолаев, И. Якубовский, М.К. Татмышевский, А.С. Славич, С.М. Новиков, Г.И. Целиков, А.А. Вишневы, А.В. Арсенин, В.С. Волков	455
В поисках эффекта Казимира с множественными равновесиями	
Д.Г. Баранов, М.И. Краснов.....	456
Оптические и терагерцовые свойства органических и неорганических нанотрубок	
М.И. Пауков, А.Е. Гольдт, Г.А. Командин, А.В. Сюй, А.Г. Насибулин, М.Г. Бурданова.....	456
Фонон-поляритоны в одноосных гиперболических материалах со случайными дефектами	
К.В. Воронин, В.С. Волков, А.Ю. Никитин	459
Детальный анализ спектров пропускания электромагнитного излучения среднего ИК-диапазона тонкими плёнками искусственного эумеланина	
З.В. Бедрань, И.О. Тюренков, С.С. Жуков, П.А. Абрамов, А.Б. Мостерт, К.А. Мотовилов	461
Расчет оптических свойств муаровых метаповерхностей при помощи фурье модального метода	
Н.С. Салахова, И.М. Фрадкин, С.А. Дьяков, Н.А. Гиппиус	462
Одномерные ван-дер-ваальсовы гетероструктуры: новый перспективный материал для оптоэлектроники	
М.Г. Бурданова.....	464
Ионно-лучевой метод создания серебряных наноструктур для сенсорных приложений	
Н.В. Дорошина, О.А. Стрелецкий, В.В. Сычев, Д.И. Якубовский, М.С. Миронов, А.А. Воронов, А.В. Арсенин, В.В. Волков, С.М. Новиков	465
Понижение порога оптического переключения суб-ТГц/ТГц-свойств метаповерхностей из VO ₂ и Au	

А.С. Славич, И.К. Домарацкий, С.С. Жуков, Р.В. Киртаев, Д.А. Мыльников, М.Е. Кутепов, Е.М. Кайдашев и В.Е.Кайдашев	
Температурные зависимости спектров комбинационного рассеяния света для дисульфида титана	
С.М. Раджам, П. Мишра, А.В. Арсенин, В.С. Волков.....	468
Анализ свойств меланина в радиочастотном диапазоне методом DRT	
П.А. Абрамов, С.С. Жуков, З.В. Бедрань, Б.П. Горшунов, А.Б. Мостерт, К.А. Мотовилов	468
Сильная поляризационная чувствительность в металл-графен-металлических ИК-детекторах	
В.А. Сёмкин, Д.А. Мыльников, Е.И. Титова, Д.А. Свинцов	470
InGaS ₃ , оптические и электронные свойства	
А.Н. Токсумаков, Г.А. Ермолаев, Н.В. Дорошина, Д.И. Якубовский, А.В. Сюй, З.И. Попов, Д.Г. Квашнин, А. В. Арсенин, Д. А. Казарян, В. С. Волков	472
Оже-рекомбинация в сильных электромагнитных полях	
Г.В. Алымов	473
Гибридные структуры металл-диэлектрик-металл для применения в ГКР	
М.К. Татмышевский, Д.И. Якубовский, О.О. Капитанова, В.Р. Соловей, Г.А. Ермолаев, Ю.А. Клишин, М.С. Миронов, А.А. Воронов, А.В. Арсенин, В.С. Волков, С.М. Новиков	475
Изучение оптически-индуцированного спинового эффекта Холла в структуре феррит-гранат/топологический изолятор	
Д.С. Гогуюева, П.В. Шилина.....	477
Спектральная эллипсометрия атомарно тонких кристаллов	
И.В. Бегичев, Ю.А. Клишин, А.Н. Токсумаков, Г.А. Ермолаев, Д.И. Якубовский, А.В. Арсенин, Д.А. Казарян, В.С. Волков	478
Терагерцовая-инфракрасная спектроскопия колебательных состояний ионов лития, локализованных в наноразмерных порах фуллеренов	
Д.А.Юламанова, С.С.Жуков, М.А. Белянчиков, А.В.Мелентьев, П.А.Жиляев, Н.Д.Орехов, Shinobu Aouagi, Б.Горшунов.....	479
Симметрично-защищённые ССК в двумерно-периодической плазмон-волноводной структуре	
Д.П. Марков, С.И. Павлов, С.А. Дьяков, Н.А. Феоктистов, А.В. Нащекин, А.Б. Певцов	480
Изучение нового поколения кремниевых волноводов с помощью ближнепольной оптической микроскопии	
Д.В. Грудинин, Г.А. Ермолаев.....	482
Поверхностные волны на границе раздела одноосного анизотропного материала и изотропного	
А.А. Белов.....	483
Дипольные моменты плазмонных и диэлектрических резонансных мета-атомов	
С.Р. Гузик	484
Исследование ультра-сильной связи между плазмонными мета-атомами и оптическим излучением	
А.Ю. Нехоченинов.....	484
Кремниевая полностью диэлектрическая метаповерхность на пленке феррита-граната для магнитооптической модуляции света в ближнем ИК-диапазоне	
М.П. Мандрик, Д.М. Кричевский , Д.О. Игнатьева , В.И. Белотелов	485
Оптические свойства полупроводниковых композитов	
В.Р. Соловей	486

Проявления нелокальной проводимости в ближнепольной микроскопии	
М. Е. Хавронин, Д. А. Свинцов	488
СЕКЦИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ОСНОВ МНОГОМАСШТАБНОГО АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ.....	490
Энергии образования точечных дефектов кубической фазы магнетита в DFT+U	
М.И. Шутикова, В.В. Стегайлов.....	490
Исследование процесса формирования кластеров при лазерной абляции методом молекулярной динамики	
А.Н. Гостевская, А.В. Маркидонов	490
Исследование устойчивости цепочечных структур пылевых частиц в плазме с конденсированной дисперсной фазой	
Д.А. Колотинский, А.В. Тимофеев	492
Вклады в коллективные движения атомов в кристаллах	
В.Д. Негодин	493
Неравновесные переходы между аморфными формами льда и расчет их модулей упругости: молекулярно-динамическое моделирование	
А.А. Гаркуль, В.В. Стегайлов.....	494
Количественная оценка характера распределения белок-липидных контактов в трансмембранных сегментах рецепторных тиразинкиназ человека	
П.Е. Попов, А.С. Кузнецов, Р.Г. Ефремов.....	495
Структурно-динамические параметры пептидов-модуляторов активности нейраминидазы-1	
Я.И. Заварзина, А.С. Кузнецов, Р.Г. Ефремов	496
Вычисление химических потенциалов разреженной фазы двухкомпонентной системы на примере FeO	
Н.А. Фоминых, В.В. Стегайлов	497
Консервативный остаток пролина в трансмембранных доменах рецепторов семейства IR: оценка структурной и функциональной роли по данным атомистического моделирования	
А.Р. Идиятуллина, А.С. Кузнецов, Я.В. Бершацкий, Р.Г. Ефремов.....	498
Предсказание возможных димерных состояний трансмембранных сегментов рецептора DDR1 с помощью методов атомистического моделирования	
Е.А. Козлов, А.С. Кузнецов, Р.Г. Ефремов.....	499
Движение краевой дислокации и малоугловых симметричных границ зерен наклона (110) в ГЦК-металлах и Al-Cu сплавах	
Е.В. Фомин, А.Е. Майер, В.С. Красников	500
Методы оценки энтропии молекулярно-динамической системы	
И. В. Аверин, А. В. Тимофеев	501
Стохастическая теория метода молекулярной динамики	
Д.В. Стрижак, М.С. Алексеева	503
О теории метода молекулярной динамики, альтернативной теневому гамильтониану (Shadow Hamiltonian)	
М.С.Алексеева, Д.В.Стрижак	504
Образования вихрей в турбулентном потоке на молекулярном уровне	

Д.Г. Павлов, В.В. Стегайлов	506
Влияние эффектов конкуренции различных типов анизотропии на поведение мультислойных магнитных структур	
А.В. Минькова, П.В. Прудников	506
Моделирование процессов немонотонной релаксации намагниченности несимметричной мультислойной магнитной структуры	
Д.А. Льготина, П.В. Прудников	508
Моделирование методом Монте-Карло критических свойств усложненного спинового вентиля	
А.С. Егорина, П.В. Прудников	510
Статистический анализ эволюции точечных дефектов в каскадах смещений на примере хромита	
М.С. Шеверев, В.В. Стегайлов	511
Построение поликристаллической структуры диоксида циркония с применением потенциала, нестабильного при переходных процессах	
Т. М. Савилов	513
Универсальные соотношения для временной эволюции локализованных состояний	
А.Е. Обжиров	514
Первопринципные расчеты магнитной анизотропии пленок Fe и Co с прослойкой платины	
М.Ю. Макеев, М.В. Мамонова	514
Теоретическое исследование влияния ориентации поверхностной грани на реализацию спиновых конфигураций в системе Co/Cu/Co	
Р.А. Сухачев, М.В. Мамонова	516
Разработка генератора случайных структур с фиксированными положениями структурных элементов для эволюционного алгоритма USPEX	
Я.В. Пропад, И.А. Круглов	518
Первопринципные расчёты магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика CrNb ₃ S ₆	
Д.В. Евсин, В.О. Борзилов, П.В. Прудников, М.В. Мамонова	520
Первопринципные расчеты структурных, энергетических и магнитных характеристик пленки никеля на поверхности вольфрама	
М.В. Мамонова, В.В. Прудников, И.Е. Шевченко	521
Использование машинного обучения для построения модели упругопластической деформации алюминия	
М.В. Леканов, А.Е. Майер	523
Молекулярно-динамический расчет транспортных коэффициентов n-додекана методом масштабирования избыточной энтропии	
Б.И. Никитюк, В.В. Писарев	525
Исследование потенциала средней силы на границах двухфазной системы	
Г.К. Вандышев	526
Структура водного раствора диоксана. Метод молекулярной динамики	
И.К. Бакулин	527
Поиск молекулярных кристаллов взрывчатых веществ с помощью потенциала COMPASS и эволюционного алгоритма USPEX	
Д.М. Снитовец, И.А. Круглов, Н.Д. Кондратюк	528

Моделирование фильтрации двухкомпонентной смеси жидкости и идеального газа	
С.Б. Лопес Висенс, В.В. Писарев	529
Предсказание транспортных свойств водных растворов сахаров методом молекулярной динамики	
В.И. Дещеня	530
Моделирование гидроксида алюминия	
В.Г. Лукьянчук	532
СЕКЦИЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ И НАНОФОТОНИКИ	534
Частично-секулярная аппроксимация для описания диссипации сильносвязанных квантовомеханических систем	
И.В. Вовченко, В.Ю. Шишков, А.А. Зябловский, Е.С. Андрианов	534
Нематическая сверхпроводимость в топологических изоляторах, индуцированная гексагональными искажениями поверхности Ферми	
Р.Ш. Акзянов, Д.А. Хохлов, А.Л. Рахманов.....	535
Частотная фильтрация излучения от некогерентно накачиваемого однофотонного источника	
И.В. Панюков, В.Ю. Шишков, Е.С. Андрианов	536
Магнитно-электронная неустойчивость графена на ферромагнитной подложке	
Д.Н. Дресвянкин, А.В. Рожков	537
Двухпараметрический сенсор водорода на основе дифракционной решетки из палладия	
Ю.В. Юанов.....	538
Гибридизация плазмонных, коллективных и Ми-подобных резонансов в кремний-никелевых нанорешетках	
К.А. Мамян, А.Ю. Фролов, В.В. Попов, А.А. Федянин	539
Рассеяние электромагнитной волны сфероидными частицами с высоким коэффициентом преломления	
М.М. Бухарин, А.А. Башарин	540
Вихрь Абрикосова и спиновый вихрь в легированном топологическом изоляторе	
А.В. Капранов, А.Л.Рахманов.....	542

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ

Д. В. Ливанов, ректор МФТИ – председатель

В. А. Баган, проректор по научной работе – заместитель

Члены программного комитета Конференции:

Д. А. Гаврилов, директор ФРКТ

Т. Е. Григорьев, директор ИНБИКСТ

В. В. Иванов, директор ФЭФМ

Д. В. Кузьмин, директор ФБМФ

С. С. Негодяев, директор ФАКТ

А. М. Райгородский, директор ФПМИ

А. В. Рогачев, директор ЛФИ

М. В. Сигова, директор ФБВТ

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ

В. А. Баган, проректор по научной работе – председатель
Е. В. Иголевиц, заместитель руководителя ЦУП – заместитель

Члены организационного комитета Конференции:

К. С. Слободчук, ведущий специалист ЦУП

Д. А. Гаврилов, директор ФРКТ

Т. Е. Григорьев, директор ИНБИКСТ

В. В. Иванов, директор ФЭФМ

Д. В. Кузьмин, директор ФБМФ

С. С. Негодяев, директор ФАКТ

А. М. Райгородский, директор ФПМИ

А. В. Рогачев, директор ЛФИ

М. В. Сигова, директор ФБВТ

Секция «ИТЭР – шаг в энергетику будущего»

УДК 533.908

Моделирование отклика детектора на основе кристалла хлорида лантана в экспериментах с регистрацией быстрых нейтронов

А.В. Панкратенко^{1,2}, Т.М. Кормилицын^{1,2}, А.С. Джэурик², Ю.А. Кащук^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Частное учреждение Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом»
«Проектный центр ИТЭР»

В работе представлены результаты сравнения функции отклика нового сцинтилляционного спектрометра быстрых нейтронов на основе кристалла $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$ с расчетными данными. Предложенный в работе [1] метод регистрации нейтронов в области энергий 2–5 МэВ с помощью этого детектора имеет значительный потенциал для современных установок УТС, работающих с дейтериевой плазмой. Регистрация быстрых нейтронов основана на детектировании продуктов реакции $^{35}\text{Cl}(n,p)^{35}\text{S}_{g.s.}$

Отклик детектора на основе кристалла размера $\varnothing 25.4 \times 25.4$ мм был исследован в двух экспериментах: в поле излучения нейтронного генератора ИНГ-07Д, а также в ходе экспериментальной кампании на циклотроне ФТИ им. А.Ф. Иоффе с использованием дискретного энергетического распределения нейтронов, рожденных в результате ядерной реакции $^9\text{Be}(\alpha,n)^{12}\text{C}$ при облучении бериллиевой мишени альфа-частицами. Проведено моделирование отклика спектрометра на быстрые нейтроны с помощью ПО GEANT [2] и сравнение результатов моделирования с аппаратными спектрами.

В ходе подготовки к работе со сцинтилляционным детектором на основе $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$ проведена калибровка энергетической шкалы спектрометра с использованием эталонных γ -источников ОСГИ и по собственному фону α -излучения кристалла. Метод цифрового разделения по форме импульса [3] отработан на α - γ разделении в предыдущих экспериментах. С помощью этого метода из спектров, полученных на циклотроне, выделены сигналы, соответствующие зарегистрированным нейтронам. Полученные нейтронные компоненты спектров, а также результаты моделирования отклика детектора позволили исследовать калибровочную зависимость кристалла от энергии налетающего нейтрона (коэффициент $p/\beta \sim 0,75$) в диапазоне от 2 до 5 МэВ, оценить чувствительность и энергетическое разрешение ($\sim 5\%$) нейтронного спектрометра, а также провести анализ спектра и определить наблюдаемые реакции.

Полученные результаты демонстрируют перспективность использования детектора $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$ для спектрометрии быстрых нейтронов в диапазоне энергий 2–5 МэВ, в том числе при экспериментах с дейтериевой плазмой на действующих токамаках.

Авторы выражают благодарность сотрудникам циклотронной лаборатории ФТИ им. Иоффе Шевелеву А.Е., Хилькевичу Е.М., Ильясовой М.В. за организацию и помощь в проведении эксперимента.

Работа выполнена в рамках государственного контракта между Частным учреждением «ИТЭР-Центр» и Государственной корпорацией по атомной энергии «Росатом» № Н.4а.241.19.21.1038 от 11 мая 2021 «Разработка, опытное изготовление, испытание и подготовка к поставке специального оборудования в обеспечение выполнения российских обязательств по проекту ИТЭР в 2021 году».

Литература

1. Кормилицын Т.М. [и др.]. О регистрации быстрых нейтронов сцинтилляционным детектором $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$ // Журнал Письма в ЭЧАЯ. 2021. Т.18, № 1(233). С. 86–97. doi: 10.1134/S154747712101009X.
2. Allison J. et al. Recent developments in GEANT4 // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip. 2016. V. 835. P. 186–225. doi: 10.1016/j.nima.2016.06.125.
3. Панкратенко А.В. [и др.]. О возможности спектрометрии D-D нейтронов сцинтилляционным детектором $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$ методом цифрового разделения сигналов по форме импульса. Принято к публикации в журнале «Письма в ЭЧАЯ». 2022. № 1(238). doi: 10.1134/S154747712101009X.

**Выбор оптимального метода защиты медьсодержащих сплавов
в составе обращенных к плазме элементов в условиях работы
в непосредственном контакте с жидким литием**

М.С. Колесник, П.Ю. Пискарев, И.В. Мазуль, В.В. Рузанов, Р.В. Рулев, А.Ю. Огурский

АО «НИИЭФА им. Д.В. Ефремова»

В современных проектируемых токамаках, таких как итальянский DTT и российский TRT, активно обсуждается идея использования жидкого лития в качестве как минимум «облагораживающей» плазму примеси, как максимум возобновляемого тепловоспринимающего покрытия обращенных к плазме компонентов (ОПК). При этом предполагаются высокие тепловые нагрузки на обращенную к плазме поверхность на уровне проекта ИТЭР (пиковые нагрузки от 5 МВт/м²). Использование лития потенциально должно помочь в уменьшении концентрации вредных примесей в плазме, образованных в результате срыва плазмы на ОПК и испарения его поверхностного слоя в объем вакуумной камеры токамака. Однако, помимо несомненных плюсов использования жидкого лития, имеются также и существенные проблемы.

Одной из технических проблем использования жидкого внутри вакуумной камеры токамака является его активное взаимодействие с другими металлами. Так, медь, являющаяся одним из наиболее популярных материалов, используемых в теплоотводящих конструкциях, крайне сильно корродирует при контакте с жидким литием в течение даже непродолжительного времени (несколько часов). В данной ситуации можно рассмотреть две задачи: либо замена теплоотводящего материала, либо его защита от пагубного воздействия лития. На данный момент крайне сложно отказаться от использования меди и сплавов на ее основе при условии заданных высоких тепловых нагрузок по причине отсутствия настолько же доступного, проверенного и подходящего по свойствам материала, поэтому рассматривается задача защиты медьсодержащих сплавов от контакта с жидким литием.

Целью данной работы является поиск и дальнейший выбор наиболее оптимального метода защиты медьсодержащих частей ОПК от контакта с жидким литием. При этом требуется универсальное решение, которое можно применить не только для защиты поверхности от попадания капель/струй лития, но и для защиты всей «медной» части компонента от паров лития, образовавшихся вследствие испарения лития под действием тепловых потоков высокой мощности.

**Динамика плотности и температуры в паровом экранирующем слое
при интенсивном плазменном воздействии на вольфрамобразцы**

*З.И. Новоселова^{1,2}, И.М. Позняк^{1,2}, Д.А. Топорков^{1,2}, Д.М. Кочнев², В.Ю. Цыбенко²,
В.А. Костюшин², Е.Д. Федулаев^{1,2}, С.В. Карелов²*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований

В условиях, характерных для переходных процессов в ИТЭР (срывов, ELM-событий, убегающих электронов, вертикальных перемещений плазменного шнура), ожидается эрозия защитных покрытий. При экспериментальном моделировании этих процессов было показано, что сильному разрушению материала препятствует эффект паровой экранировки [1]. Суть этого эффекта заключается в том, что при воздействии на покрытие достаточно мощного плазменного потока происходит интенсивное испарение материала с последующей ионизацией пара. Паровая плазма эффективно преобразует энергию в излучение, тем самым, уменьшая тепловое воздействие на поверхность.

Цель данной работы – определение динамики плотности и температуры электронов в слое приповерхностной плазмы при воздействии водородных плазменных потоков на образцы из вольфрама.

В рамках представленной работы модельные эксперименты проводились на импульсном плазменном ускорителе МК-200UG (ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк). В ходе экспериментов плоские вольфрамовые мишени подвергались плазменному облучению со следующими параметрами: полное энергосодержание налетающего потока Q составляло от 20 до 30 кДж, а его длительность – $t_{pl} \approx 15$ мкс.

Облучение образцов происходило при двух значениях магнитного поля в мишенной камере – $B = 1$ Тл и 2 Тл. Схема эксперимента представлена на рис. 1.

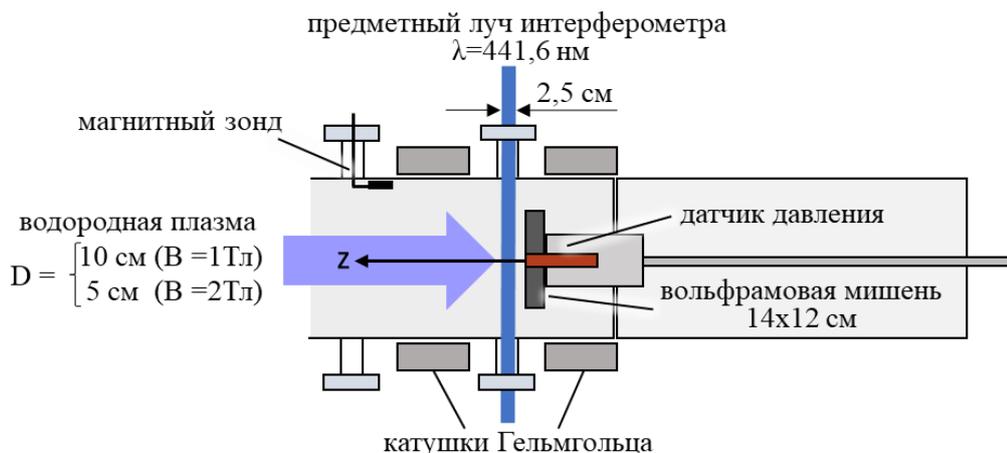


Рис. 1. Схема эксперимента: мишенная камера, вид сверху

Электронная плотность примешенной плазмы $n_e(t,z)$ измерялась с помощью интерферометра Маха–Цендера и высокоскоростного фоторегистратора ВФУ-1. Для обработки интерферограмм была написана специальная программа, при помощи которой по смещению интерференционных полос определялось распределение $n_e(t,z)$. В ходе проделанной работы были получены следующие закономерности:

1) При увеличении полного энергосодержания Q и магнитного поля B плотность примешенной плазмы возрастает, а градиент $\frac{dn}{dz}$ вблизи мишени уменьшается. В исследованном диапазоне Q и B максимум $n_e(t,z)$ принимает значения от $1,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ до $4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

2) При удалении от мишени на $z = 50 - 65$ мм наблюдается значительная задержка (30 мкс) появления максимума плотности $n_e(t,z)$ в области наблюдения. При этом абсолютное значение максимума оставалось примерно на том же уровне, что и вблизи мишени.

Динамика электронной температуры $T(t)$ паровой плазмы оценивалась исходя из измерений плотности и давления $p(t) = 2 n_e(t,z) \cdot k \cdot T(t)$, где k – постоянная Больцмана. На рис. 2 представлены зависимости от времени давления, плотности и температуры в паровом слое при $Q = 25$ кДж, $B = 2$ Тл. Значение плотности определялось на расстоянии 18 мм от поверхности мишени. Время отсчитывалось от начала разряда ускорителя.

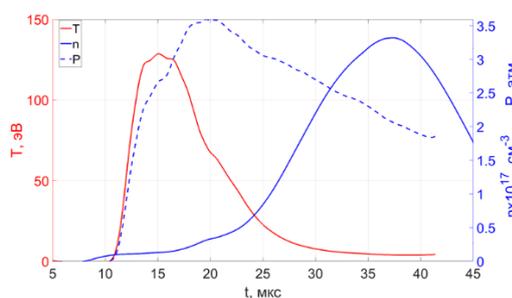


Рис. 2. Эволюция температуры, плотности и давления приповерхностной плазмы при $Q = 28$ кДж, $B = 2$ Тл

На основании полученных данных можно сделать следующие выводы:

1) В исследованном диапазоне Q и B температура плазмы вблизи поверхности возрастает до максимального значения T_{\max} за 1–3 мкс от начала облучения. Указанное время совпадает с временем формирования экранирующего плазменного слоя, определённым в ходе экспериментов по высокоскоростной съёмке этого процесса [2].

2) При увеличении энергосодержания плазменного потока T_{\max} также увеличивается. Так, вблизи поверхности ($z = 20$ мм) при $B = 1$ Тл и $Q = 20$ кДж величина T_{\max} составляет 15 эВ, а при $Q = 25$ кДж – $T_{\max} = 30$ эВ. Рост магнитного поля от 1 до 2 Тл ведёт к возрастанию температуры плазмы примерно на порядок величины.

3) В исследованном диапазоне Q и B в течение 3–5 мкс после формирования экранирующего плазменного слоя температура перестает меняться. Наблюдается переход к квазистационарной фазе

взаимодействия между налетающим на мишень плазменным потоком и расширяющимся ему навстречу испаренным веществом мишени.

4) В поле $B = 2$ Тл при $Q = 28$ кДж были получены распределения $p(t)$, $n(t)$ и $T(t)$ на различных расстояниях z от мишени. Установлено, что при перемещении за пределы экранирующего слоя ($z = 70 - 78$ мм) плотность плазмы достигает значения $6,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ (25 мкс от начала разряда ускорителя) и далее практически перестает меняться. Вблизи поверхности плотность продолжает расти и после 40 мкс от начала разряда. По-видимому, увеличение плотности плазмы в экранирующем слое обусловлено поступлением в него частиц с поверхности мишени, а не налетающим на мишень водородным потоком.

Литература

1. Pitts R.A., Carpentier S., Escourbiac F. [et al.]. A full tungsten divertor for ITER: Physics issues and design status // Journal of Nuclear Materials. 2013. V. 438. P. S48–S56.
2. Новоселова З.И., Позняк И.М. [и др.]. Исследование эффекта паровой экранировки вольфрама в условиях, характерных для быстрых процессов в ИТЭР // Труды 62-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 18–24 ноября 2019 года. Фундаментальная и прикладная физика. М.: МФТИ, 2019. С. 365–367.

УДК 621.791

Многократный отжиг бронзы CuCrZr-IG и его влияние на свойства материала

П.Ю. Пискарев, А.А. Герваш, С.В. Бобров, В.В. Рузанов, Д.С. Мамбеткеримов

АО «НИИЭФА»

Низколегированный дисперсионно-твердеющий медный сплав (бронза) CuCrZr-IG (см. табл. 1) является одним из основных материалов обращённых к плазме компонентов (ОПК) ИТЭР (панели первой стенки и кассеты дивертора) и применяется в качестве теплоотводящего слоя многослойной структуры ОПК.

Таблица 1. Химический состав CuCrZr-IG

Сплав	Базовые элементы сплава и примеси (вес.%)					
	Cu	Cr	Zr	O	Другие эл-ты	Всего др. эл-ов
CuCrZr-IG	осн.	0.6–0.9	0.07–0.15	Макс. низкое	Co < 0.05	< 0.1

В процессе изготовления ОПК выполняется многократный нагрев изделия на разных стадиях технологического процесса:

- диффузионная сварка бронзы CuCrZr-IG с нержавеющей сталью 316L(N)-IG (основной структурный материал ОПК) при температуре 980 °С с выдержкой 120 мин;
- отжиг на твёрдый раствор при температуре 980 °С с выдержкой 30 мин с закалкой (как в воду, так и газом в вакууме) и последующим старением (для повышения прочности бронзы) при температуре 480 °С с выдержкой 180 мин;
- отжиг на снятие напряжений при температуре 980 °С с выдержкой 30 мин и последующим медленным или форсированным охлаждением;
- пайка облицовки при температуре 680 °С/970 °С (Be/W облицовка);
- термостабилизирующий отжиг при температуре 425 °С с выдержкой 120 мин.

Причем отжиг на снятие напряжений может выполняться несколько раз на разных этапах. В результате бронза CuCrZr-IG подвергается многократному нагреву и выдержке при повышенных температурах. Учитывая то, что данный сплав является термочувствительным, и полученные в конечном изделии характеристики (см. табл. 2) напрямую связаны с термической историей его изготовления [1], актуальным является проведение исследования на тему влияния многократного нагрева CuCrZr-IG на достижимые характеристики данного сплава.

Таблица 2. Требования к характеристикам CuCrZr-IG в ОПК ИТЭР

Параметр	Требуемое значение
Размер зерна $D_{ср}$, мкм	≤ 200
Максимальный размер зерна CuCrZr-IG в количестве не более 10%, мкм	≤ 300
Прочность на растяжение σ_B при 20 °С / 250 °С, МПа	$\geq 280 / 220$
Предел текучести CuCrZr-IG $\sigma_{0.2}$ при 20 °С / 250 °С, МПа	$\geq 240 / 200$
Полное удлинение CuCrZr-IG δ при 20 °С / 250 °С, %	$\geq 17 / 10$
Электропроводность CuCrZr-IG при 20 °С, % IACS	≥ 75

Указанное исследование было проведено в данной работе, выполнен анализ влияния многократного отжига при температуре 980 °С с последующей закалкой на ряд характеристик CuCrZr-IG. Результаты исследования могут быть полезны для принятия решения о дальнейшей оптимизации технологического процесса изготовления ОПК ИТЭР и других термоядерных установок.

Литература

1. Николаев А.К., Костин С.А. Медь и жаропрочные медные сплавы: энциклопедический терминологический словарь: фундаментальный справочник. М. : Издательство ДПК Пресс, 2012. 720 с.

УДК 533.922

Испытания макета дивертора в режиме «качания» тепловой нагрузки

*Рулёв Р.В., Колесник М.С., Кузнецов В.Е., Мазуль И.В.,
Пискарев П.Ю., Рузанов В.В., Танчук В.Н.*

Акционерное общество «НИИЭФА им. Д.В. Ефремова»

В существующих термоядерных установках с магнитным удержанием плазмы, а также находящихся на стадии проектирования и/или строительства, тепловые нагрузки на обращенные к плазме элементы дивертора достигают предельно допустимых значений для выбранных материалов и конструкций. Расчетная тепловая нагрузка на элементы дивертора в этих установках может достигать 20 МВт/м² в переходных процессах длительностью не более 10 секунд, что является принятым на текущий момент инженерным лимитом для конструкции. В случае увеличения тепловой нагрузки вследствие различных причин (непропорциональное увеличение мощности, выносимой в дивертор; неработоспособность концепции газовой мишени; ошибки в расчетах и пр.) существенно снижается ресурс элементов дивертора, что приводит к преждевременному разрушению конструкции и защитной облицовки данных элементов. Это влечет за собой необходимость выполнения ремонта или частой замены компонентов дивертора. Поиск возможности увеличения ресурса работы обращенных к плазме элементов дивертора в условиях повышенных тепловых нагрузок до 30–40 МВт/м² является одним из ключевых вопросов в развитии термоядерных установок будущего.

В АО «НИИЭФА» была разработана концепция «качающегося» дивертора, которая подразумевает движение элементов дивертора таким образом, чтобы падающая на поверхность тепловая нагрузка могла быть распределена по большей площади, тем самым снизив плотность мощности теплового потока, что уменьшит риски разрушения обращенных к плазме элементов.

Для проверки работоспособности данного подхода был изготовлен макет из медной трубы квадратного сечения, где располагались четыре зоны с вольфрамовой облицовкой различного формата. Чертеж макета представлен на рис. 1. За счет «качания» тепловой нагрузки по поверхности облицовки вдоль макета имитировались условия характерные для облицовки «качающегося» дивертора.

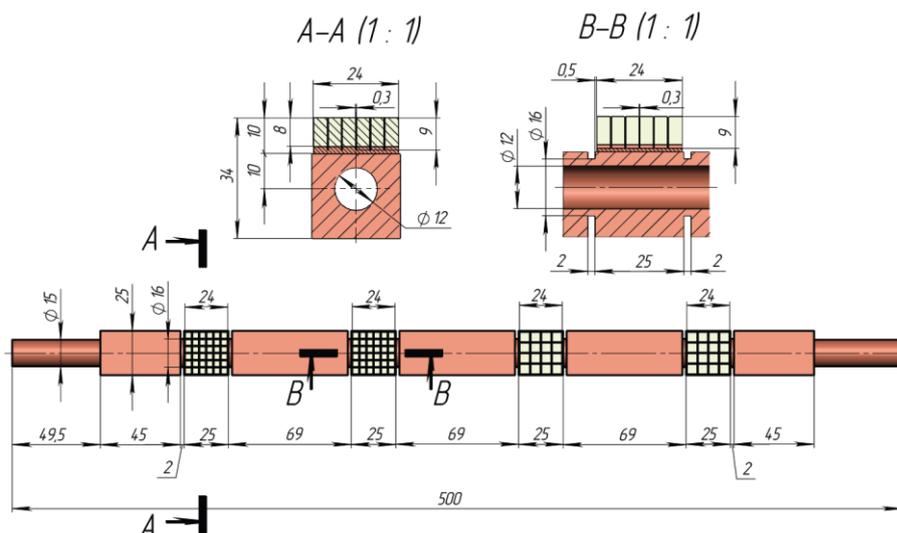


Рис. 1. Макет «качающегося» дивертора для проведения тепловых испытаний

Целью данной работы является проверка работоспособности концепции «качающегося» дивертора для термоядерных установок с повышенными требованиями к теплосъему обращенных к плазме элементов. Тепловые испытания были проведены на стенде «Цефей-М». Во время тепловых испытаний достигнуты значения плотности поглощенной мощности на макете в 30 МВт/м^2 и проведены термоциклические испытания с общим количеством циклов, превышающим 100 000.

УДК 533.924

Импульсная плазменная установка МК-200

для экспериментального моделирования переходных процессов в ИТЭР

А.В. Пушина^{1,2}, Д.А. Топорков^{2,3}, Д.А. Бурмистров^{2,4}, В.А. Костюшин², С.Д. Лиджигорьев^{2,3}, Р.Р. Усманов², К.В. Журавлев², А.А. Жарова², С.В. Карелов², И.М. Позняк^{2,3}, В.Ю. Цыбенко², Е.Д. Федулаев^{2,3}, З.И. Новоселова^{2,3}

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

²Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований

³Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

⁴Национальный исследовательский университет «МЭИ»

ИТЭР – международный проект, создаваемый как источник энергии на основе управляемого термоядерного синтеза. Его успешная реализация в значительной степени зависит от правильного выбора обращенных к плазме материалов вакуумной камеры токамака. Для обоснования этого выбора необходимы экспериментальные данные о поведении материалов под действием интенсивных плазменных потоков [1, 2]. Кроме этого, такие данные могут использоваться для разработки и проверки расчетно-теоретических моделей, описывающих поведение защитных покрытий вакуумной камеры ИТЭР.

Существующие токамаки не обеспечивают плазменно-тепловые нагрузки, ожидаемые в ИТЭР, поэтому для испытаний материалов применяют плазменные ускорители, электронные пучки, лазеры и т.д. Цель данной работы – исследовать различные режимы работы импульсной плазменной установки МК-200 («ГНЦ РФ ТРИНИТИ», Троицк) и определить параметры создаваемого ей плазменного потока для последующего экспериментального моделирования воздействия горячей плазмы на материалы защитных покрытий термоядерных установок.

Схема установки МК-200 представлена на рис. 1. Она состоит из импульсного плазменного ускорителя, плазмопровода длиной 3 м и мишенной камеры. Ускоритель питается от конденсаторного накопителя, емкость которого составляет 1,1 мФ. В качестве плазмообразующего газа использовался дейтерий. Плазмопровод и мишенная камера заполнены продольным магнитным полем, которое может варьироваться в диапазоне от 0 до 2 Тл.

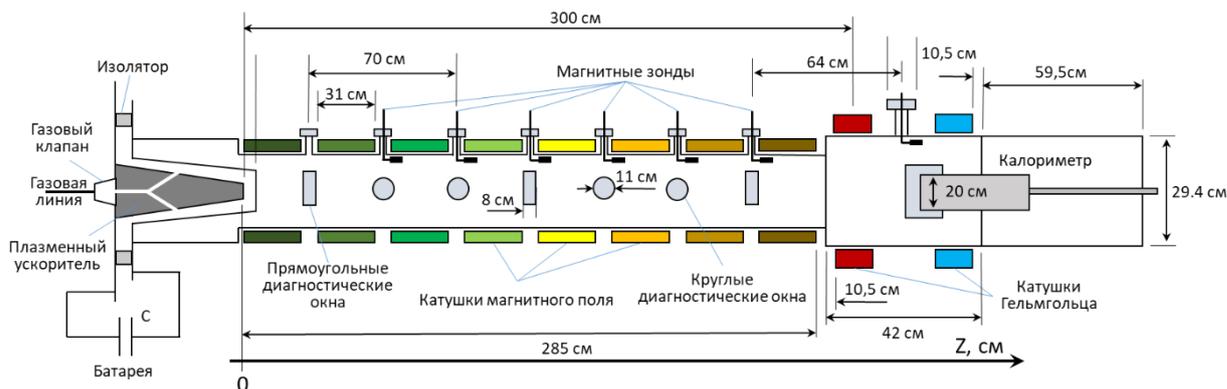


Рис. 1. Схема плазменной установки МК-200

Для измерения параметров плазменного потока и контроля за режимами работы ускорителя использовался ряд диагностических средств, таких как: пристеночные магнитные зонды, калориметр, пояс Роговского и омический делитель напряжения. Исследования проводились при различных значениях напряжения на конденсаторном накопителе U – от 14 до 26 кВ (что соответствует запасенной в нем энергии от 110 до 370 кДж), сортах и количествах рабочего газа, напускаемого в межэлектродный зазор ускорителя (время напуска τ от 230 до 390 мкс).

По показаниям магнитных зондов были определены скорость и энергия направленного движения ионов плазмы, длительность, длина плазменного потока, его диаметр. Кроме этого, были вычислены газокинетическое давление плазмы и энергия, приходящаяся на единицу длины потока. Из показаний калориметра получено полное энергосодержание плазмы и проведена оценка ее плотности. Пояс Роговского позволил контролировать ток разряда ускорителя $I(t)$. Для измерения напряжения $U(t)$ использовался высоковольтный омический делитель. По ним вычислялась мощность и энергия, вложенные в разряд. На основе проделанных измерений проводилась оценка эффективности работы ускорителя.

Основные параметры потока плазмы, создаваемого установкой МК-200, представлены в таблице:

Параметр	Значения
Полное энергосодержание Q , кДж	35–110
Погонная энергия Q/L , Дж/см	40–100
Тепловая нагрузка q , МДж/м ²	1–9
Скорость ионов V , км/с	400–700
Энергия ионов E , кэВ	3–9
Магнитное поле B , Тл	0–2
Длительность плазменного потока t , мкс	10–25

По таким параметрам, как тепловая нагрузка на поверхность, направленная энергия ионов плазмы, наличие сильного магнитного поля в мишенной камере, МК-200 воспроизводит условия, ожидаемые во время переходных плазменных процессов в ИТЭР. К недостаткам МК-200UG (в рамках задачи испытания защитных покрытий токамака) следует отнести небольшую длительность плазменного потока $t = 10 - 25$ мкс. Однако это не мешает исследовать основные физические процессы, определяющие результаты воздействия интенсивных потоков плазмы на материалы, поскольку уже на начальной стадии взаимодействия, за $1 - 2$ мкс $\ll t$, вблизи поверхности образуется плотный экранирующий слой плазмы, который защищает материал от прямого воздействия налетающего плазменного потока. После образования экранирующего слоя наступает квазистационарная стадия взаимодействия (≈ 15 мкс), когда передача энергии на мишень и соответственно эрозия материала определяются процессами в приповерхностном плазменном слое.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках проектов № 18-29-21013 и № 20-21-00153.

Литература

1. Климов Н.С., Подковыров В.Л., Житлухин А.М., Сафронов В.М., Коваленко Д.В., Москачёва А.А., Позняк И.М. Разбрызгивание вольфрама при воздействии интенсивного потока плазмы // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Термоядерный синтез. 2009. № 2. С. 52–61.
2. Климов Н.С., Подковыров В.Л., Житлухин А.М., Архипов Н.И., Сафронов В.М., Барсук В.А., Позняк И.М., Loarte A., Merola M., Linke J. Воздействие интенсивных импульсных потоков плазмы на защитные материалы внутрикамерных компонентов термоядерного реактора // Ядерная физика и инжиниринг. 2010. Т. 1, № 3. С. 210–219.

УДК 539.1.074.88

Бенчмарк-эксперимент измерения ослабления нейтронного потока конструкционными материалами ИТЭР с помощью нейтронных спектрометров

Д.С. Фридрихсен^{1,2,3}, Т.М. Кормилицын^{1,2,3}, С.Ю. Обудовский^{1,3}, А.О. Ковалев^{1,3},
Ю.А. Кащук^{1,2,3}

¹Частное учреждение Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом»
«Проектный центр ИТЭР»

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Акционерное общество «Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»

На данный момент в мире построено около 300 токамаков. Самым большим будет строящийся в настоящее время на юге Франции токамак-реактор ИТЭР (англ. *International Thermonuclear Experimental Reactor*). ИТЭР должен стать первым экспериментальным термоядерным реактором, на котором протестируют большинство технологий, необходимых для коммерческого производства электроэнергии на основе термоядерного синтеза. Реактор на основе токамака будет работать на дейтерий-тритиевом (DT) топливе, реакция синтеза в котором сопровождается рождением ~14,1 МэВ нейтрона.

Значительная часть термоядерной мощности реактора выделяется в виде нейтронного излучения. В связи с этим возникают специальные требования к защитным конструкционным материалам, как с точки зрения ослабления прямого нейтронного потока, так и с точки зрения активации материалов в долгосрочной перспективе. Существует необходимость обслуживания систем реактора, а значит, задачи минимизации наведенной активности и защиты от ионизирующего излучения являются крайне актуальными. Особую роль при разработке ИТЭР играют задачи моделирования процессов активации конструкционных материалов в результате облучения нейтронами. Таким образом, бенчмарк-эксперименты, позволяющие подтвердить соответствие свойств конструкционных материалов заявленным и провести валидацию используемых расчетных кодов и ядерных констант, являются крайне важной задачей. Результаты таких экспериментов могут послужить источником референтных данных для коррекции расчетных моделей.

Таблица 1. Сравнение макроскопических сечений, полученных экспериментально, модельно и аналитически

Материал барьерной защиты	Метод определения макроскопического сечения Σ [см ⁻¹]			
	Алмазный детектор	Сцинтилляционный детектор (стильбен)	Расчёт MCNP	Аналитический расчёт
Полиэтилен (C ₂ H ₄) _n	$\Sigma = 0.084 \pm 0.009$	$\Sigma = 0.089 \pm 0.002$	$\Sigma = 0.099$	$\Sigma = 0.094$
Сталь марки SS316L-IG	$\Sigma = 0.124 \pm 0.011$	$\Sigma = 0.140 \pm 0.002$	$\Sigma = 0.139$	$\Sigma = 0.143$

Для целей исследования с помощью П, табл.1.

О MCNP [1] была разработана модель прохождения потока быстрых DT-нейтронов через набор материалов различной толщины (от 0 см до 24 см с шагом 4 см): полиэтилен и нержавеющая сталь SS316L-IG, разработанная специально для токамака реактора ИТЭР. Для проверки модели проведена экспериментальная кампания на стенде нейтронной диагностики АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ» по измерению потока и распределения по энергии быстрых DT-нейтронов при прохождении через исследуемые образцы. Ионизирующее излучение создавалось нейтронным генератором ИНГ-07Т (E_n ~ 14,5

МэВ) [2]. В качестве монитора потока прямых нейтронов, измеряющего распределение нейтронов по энергиям, использовался сцинтилляционный (кристалл стибьена, размер $\varnothing 20 \times 20$ мм) и полупроводниковый алмазный детекторы (размер $4 \times 4 \times 0,5$ мм) нейтронов.

В работе представлены экспериментальные данные и модельные результаты расчетов ослабления потока $\sim 14,5$ МэВ термоядерных нейтронов барьерами из полиэтилена и нержавеющей стали марки SS316L(N)-IG. А также приведена аналитическая оценка свойств ослабления (макроскопическое сечение Σ) нейтронного DT-излучения исследуемыми материалами барьерной защиты. Основные результаты бенчмарк-эксперимента приведены в табл. 1.

Литература

1. *Goorley J. [et al.]*. Initial MCNP6 Release Overview – MCNP6 version 1.0. – Los Alamos National Lab., United States (2013).
2. *S. Yu. Obudovskii [et al.]*. Metrological assurance of thermonuclear neutron flux density measurements – Measurement Techniques, V. 59, N 3 (2016).

УДК 533.9.01

Влияние магнитных островов на траектории движения заряженных частиц в токамаке

Д.Р. Абдувалеев, В.Ю. Савин

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

В плазме токамака часто наблюдаются отклонения частиц от равновесных траекторий вследствие наличия аксиальной асимметрии линий магнитного поля. Это вызвано тем, что в плазме присутствуют различного рода возмущения геометрии силовых линий магнитного поля. В частности, в работе рассматривается случай образования магнитных островов [1], приводящих к изменению траектории движения заряженных частиц. Как следствие, плазма становится неконтролируемой, что приводит к потерям вещества и накопленной в системе энергии.

Подтверждением актуальности рассмотрения данного влияния являются эксперименты на немецком токамаке ASDEX Upgrade [2], в которых исследовался процесс потерь высокоэнергетических частиц, вызванный неоклассическими тиринг-модами. Было показано, что пересечение дрейфовых островов приводит к стохастизации орбит и дополнительной потере частиц, механизм которой на данный момент исследован неполно.

Рассматривается движение α -частицы в системе с тороидальной геометрией. Для нахождения траектории движения частицы в заданных магнитных полях использован метод дрейфового приближения [3]. Моделирование движения α -частицы проводилось путём численного интегрирования уравнений движения (система СГС):

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = v_p \frac{\vec{B}}{B} + \frac{mcv_p^2}{eB^4} \left[\frac{\vec{u}}{B}; \left(\frac{\vec{u}}{B}; \nabla \right) \frac{\vec{u}}{B} \right] + \frac{mcv_p^2}{2eB^3} \left[\frac{\vec{u}}{B}; \nabla B \right], \quad (1)$$

$$\frac{d\chi}{dt} = -\frac{\mu v}{2EB} \cdot \frac{\partial B}{\partial \theta} \cdot \frac{B_\theta}{r}, \chi = \frac{v_p}{v}, \mu = \frac{mv_\perp^2}{2B}, \quad (2)$$

здесь c – скорость света, m – масса α -частицы, e – заряд электрона, \vec{r} – радиус-вектор частицы, \vec{B} – магнитная индукция, v_\parallel и v_\perp – продольная (вдоль линий магнитного поля) и поперечная составляющие скорости, E – полная механическая энергия частицы, μ – первый адиабатический инвариант, B_θ – полоидальная компонента магнитного поля.

Отслеживание точности численного интегрирования проводилось с помощью введённого первого адиабатического инварианта, который в условиях задачи сохраняется.

Результаты численных расчётов движения α -частицы, производящихся при параметрах токамака ASDEX Upgrade: $a = 85$ см, $R_0 = 165$ см, $I_0 \cong 2 \cdot 10^6$ А, $B_0 \cong 3.1$ Тл (a, R_0 – малый и большой радиусы тора соответственно, I_0 – полный ток, B_0 – магнитное поле в центре вакуумной камеры), а также при начальной скорости α -частицы $v \sim 10^9$ см/с, показали, что её траектория зависит от направ-

ления начальной скорости, что согласуется с тем, что частицы в плазме токамака могут быть пролётными и запертыми. Это косвенно подтверждает корректность алгоритма расчёта движения заряженной частицы.

Один из способов создания возмущения магнитного поля – это задание его радиальной компоненты:

$$B_r = \frac{\Psi_0 m}{2\pi r (R_0 + r \cos \theta)} \sin(m\theta - n\varphi), \quad (3)$$

где Ψ_0 – амплитуда возмущения магнитного потока, φ, θ – тороидальный и полоидальный углы, m, n – натуральные числа, определяющие моду возмущения. Сечения Пуанкаре силовых линий магнитного поля для моды $m = 2, n = 1$ при различных амплитудах возмущения показаны на рис. 1.

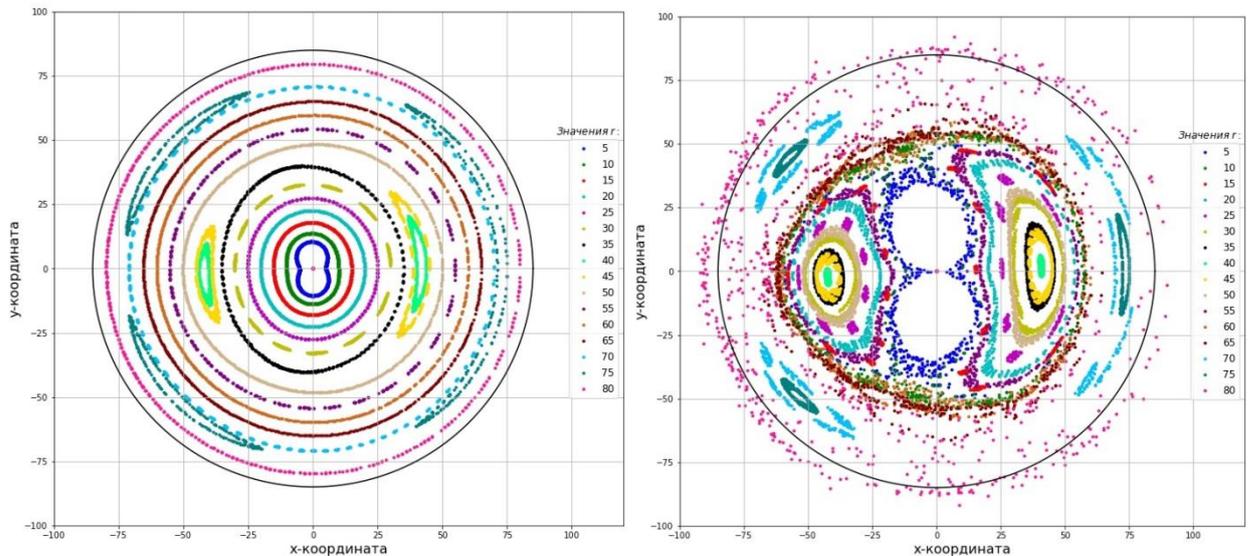


Рис. 1. Магнитный остров, мода возмущения $m = 2, n = 1$. Амплитуда возмущения составляет одну тысячную (а) и одну сотую (б) от полоидальной компоненты поля B_θ

Из рис. 1 видно, что при увеличении амплитуды возмущения происходит стохастизация силовых линий и пересечение ими стенки вакуумной камеры (чёрная окружность на рисунках), что приводит к потерям вещества и накопленной в системе энергии.

Разработанный алгоритм согласуется с современными теориями и численными моделями [4, 5], и в дальнейшем может быть использован для описания движения запертых и пролётных частиц при наличии возмущения. Кроме того, дальнейшее улучшение алгоритма позволит исследовать методы подавления магнитных островов в токамаке.

Литература

1. Wilson H.R. Neoclassical tearing modes // Fusion science and technology. 2012. V. 61, № 2Т. P. 113–121.
2. García-Muñoz M. [et al.]. NTM induced fast ion losses in ASDEX Upgrade // Nuclear fusion. 2007. V. 47, N 7. P. L10.
3. Морозов А.И., Соловьев Л.С. Движение заряженных частиц в электромагнитных полях // Вопросы теории плазмы. 1963, № 2. С. 177–261.
4. Подтурова О.И. Магнитные острова и удержание заряженных частиц в тороидальных магнитных системах // Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science. 2015, N 2.
5. Морозов Д.Х. Введение в теорию горячей плазмы. Ч. 1. 2013.

Разработка системы магнитной изоляции источника плазмы диагностического инжектора токамака Т-15МД

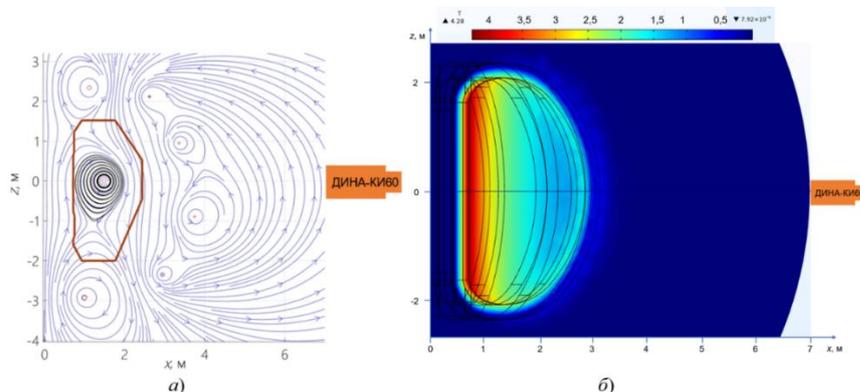
М.У. Ильясов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Высокоэнергетические нейтральные пучки нашли широкое применение для диагностики высокотемпературной плазмы в токамаках [1]. Они предоставляют огромные возможности для проведения различного рода диагностик, одной из которых является CXRS-спектроскопия, осуществляемая с использованием специальных нейтральных инжекторов. Одним из препятствий на пути эффективной инжекции нейтрального пучка является внешнее магнитное поле токамака, отклоняющее частицы до нейтрализации, для чего в конструкции инжектора необходимо предусмотреть систему магнитной изоляции.

Целью данной работы является создание конструкции магнитного экрана для диагностического инжектора ДИНА-КИ60, который бы смог эффективно экранировать внешнее магнитное поле, создаваемое электромагнитной системой токамака Т-15МД [2, 3].

Первым этапом настоящей работы стал расчет составляющих полоидального и тороидального магнитных полей токамака Т-15МД, результаты которого приведены на рис. 1.



а) топология магнитных силовых линий полного полоидального поля; б) цветовая диаграмма распределения магнитной индукции тороидального поля

Рис. 1. Визуализация результатов расчета, составляющих магнитного поля токамака Т15-МД в плоскости x-z

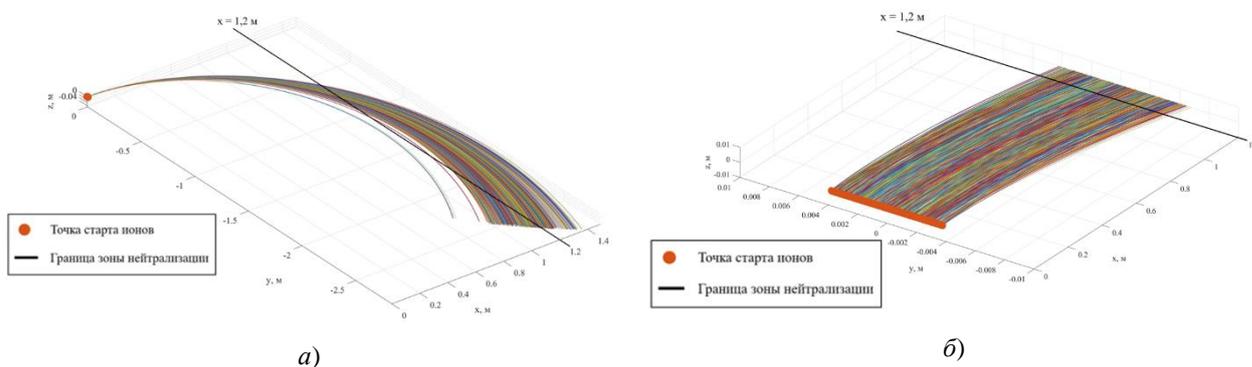
Согласно проведенному расчету, величина магнитной индукции полоидального поля вблизи ионно-оптической системы инжектора составила 0,0043 Тл. Однако в то же время значения магнитной индукции тороидального поля на аналогичном удалении от оси токамака не превысили величин порядка $1,6 \times 10^{-6}$ Тл, что является на несколько порядков меньшей величиной, позволившей нам пренебречь ее значением. Таким образом, в окрестности инжектора ДИНА основной вклад в формирование суммарной магнитной конфигурации будет давать именно полоидальное поле от плазмы и управляющих катушек.

Далее было проведено численное моделирование траекторий движения пучка положительно заряженных ионов в ионно-оптической системе инжектора ДИНА-КИ60 до и после компенсации внешнего магнитного поля токамака, результаты которого представлены на рис. 2.

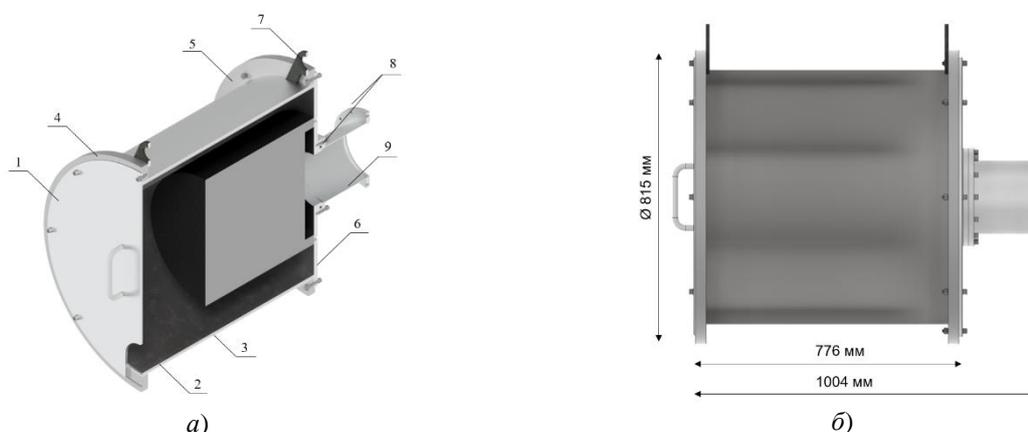
В результате моделирования был рассчитан коэффициент уменьшения величины индукции магнитного поля, $k = 300$, при котором пучок ионов не будет испытывать значительного отклонения (рис. 2 б). Далее были сформулированы основные требования к магнитному экрану и создана его конструкция, которая бы обеспечила необходимый коэффициент k . Разработанный экран изображен на рис. 3.

В качестве экранирующего элемента был выбран лист пермаллоя 80НХС толщиной 3 мм. Для удобства доступа к источнику плазмы на свободной торцевой поверхности экрана предусмотрена съемная крышка с отверстием для вывода проводов электропитания и водяного охлаждения, что позволяет избежать усложнения и удорожания конструкции. Для подъема и установки конструкции на

посадочные места в верхней его части предусмотрены приварные стальные петли. Масса разработанной конструкции равна 345 кг.



а) до компенсации внешнего магнитного поля; б) после компенсации внешнего магнитного поля
Рис. 2. Траектории частиц ионного пучка в ионно-оптической системе инжектора



а) конструкция экрана: 1 – крышка левая, 2 – основа из нержавеющей стали, 3 – экран большой, 4 – стакан левый, 5 – стакан правый, 6 – крышка правая, 7 – петли, 8 – фланцы вакуумные, 9 – экран малый
б) характерные размеры экрана

Рис. 3. Магнитный экран (черным показано расположение источника плазмы)

Литература

1. Жданов С.К. [и др] Основы физических процессов в плазме и плазменных установках / под ред. Курнаева В.А. Москва : МИФИ, 2007. 368 с.
2. Krupin V. [et al.]. The development of charge exchange recombination spectroscopy diagnostics for the T-15MD tokamak // 3rd European Conference on Plasma Diagnostics. 2019 (ECPD2019).
3. Хвостенко П.П. [и др.]. Экспериментальная термоядерная энергетическая установка токамак.
4. Т-15МД. ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2019. Т. 42, вып. 1.
5. Зимин А.М. Математическое моделирование процессов в плазменных установках : учеб. пособие. Москва : Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2006. 116 с. : ил.
6. Полонский Н.Б. Конструирование электромагнитных экранов для радиоэлектронной аппаратуры. Москва : Сов. радио, 1979. 216 с. : ил. (Библиотека радиоконструктора).

Моделирование эффекта гало с использованием кодов SOS и FIDASIM для активной спектроскопической диагностики на установке ИТЭР

Г.С. Павлова^{1,2}, С.В. Серов², С.Н. Тугаринов²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Частное учреждение Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом»
«Проектный центр ИТЭР»

Одной из диагностик, которые будут использоваться на установке ИТЭР, является активная спектроскопическая диагностика, обозначаемая в англоязычной литературе аббревиатурой CXRS (Charge eXchange Recombination Spectroscopy) [1, 2]. Эта диагностика позволяет измерять параметры плазмы, такие как концентрация ионов n_z , их температура T_i и скорость вращения v . Принцип ее работы основан на анализе излучения, возникающего из-за перезарядки ионов плазмы на атомах высокоэнергетического пучка, инжектируемого в плазму.

Регистрируемый спектр состоит из нескольких спектральных контуров (см. рис. 1), но информация об ионной компоненте плазмы содержится в линии активной перезарядки. Инжекция высокоэнергетического пучка атомов водорода приводит к образованию облака атомов «гало» вокруг области прохождения диагностического пучка через плазму. Наличие эффекта гало вызывает увеличение интенсивности линии активной перезарядки и искажение её формы [3, 4], из-за чего могут возникать ошибки измерения параметров плазмы.

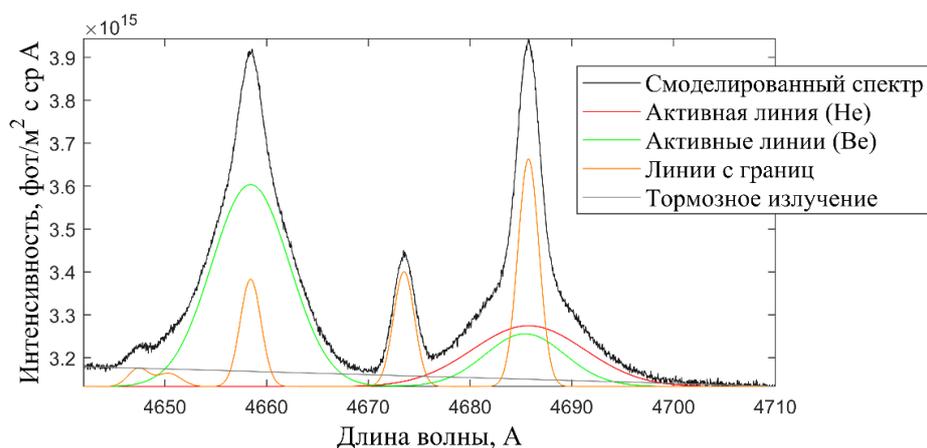


Рис. 1. Спектральный профиль, смоделированный для установки ИТЭР и его компоненты

С помощью кода Simulation of Spectra (SOS) [5] было проведено моделирование эффекта гало для четырёх примесей He, C, Be, Ne с концентрациями 4%, 0.1%, 2%, 0.3% относительно концентрации электронов и изотопов водорода для основных сценариев работы установки ИТЭР. Были оценены статистические ошибки измерения отношения концентраций n_T/n_D и пространственное разрешение диагностики. С помощью кода FIDASIM [6, 7] также было проведено моделирование для оценки влияния эффекта гало на работу активной спектроскопической диагностики. Спектральная линия, возникающая из-за эффекта гало, вместе с линией активной перезарядки D показана на рис. 2 для точки наблюдения с нормированным радиусом плазменного шнура $\rho=0.85$. Они были смоделированы с использованием кода SOS.

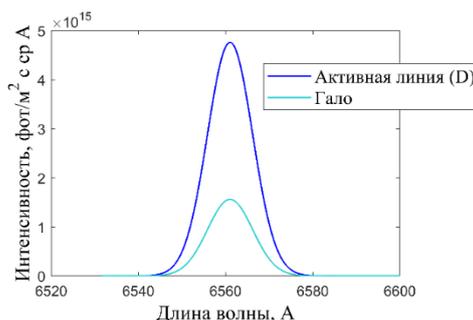


Рис. 2. Интенсивность активной перезарядки D и интенсивность гало ($\rho = 0.85$)

По результатам моделирования был оценён вклад излучения, вызванного эффектом гало, в интенсивность наблюдаемой линии активной перезарядки. Кроме того, было оценено влияние этого эффекта на точность измерений, проводимых с помощью активной спектроскопической диагностики. Было проведено сравнение результатов, полученных при моделировании в коде FIDASIM и в коде SOS. По этим данным можно сделать вывод, что эффект гало необходимо учитывать и моделировать при обработке данных, полученных с помощью активной спектроскопической диагностики на ИТЭР.

Эта работа была выполнена в соответствии с государственным контрактом от 11.05.2021 № Н.4а.241.19.21.1038 между Государственной корпорацией по атомной энергии «Росатом» как Государственным заказчиком и Частным учреждением: Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом» «Проектный центр ИТЭР».

Литература

1. Тугаринов С.Н. [и др.]. Разработка концепции активной спектроскопической диагностики с использованием диагностического пучка атомов, применительно к установке ИТЭР // Физика плазмы. 2004. Т. 30, № 2. С. 147–154.
2. Серов С.В., Тугаринов С.Н., von Hellermann M. Моделирование спектров излучения плазмы ИТЭР с использованием кода ADAS для диагностики активной спектроскопии // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2018. Т. 41, № 2. С. 89–94.
3. Hogan J.T. Calculation of hydrogen density in toroidal plasma // Journal of Nuclear Materials. 1982. V. 111/112. P. 413–419.
4. Grierson B.A. [et al.]. Active spectroscopic measurements of the bulk deuterium properties in the DIII-D tokamak (invited) // Review of Scientific Instruments. 2012. V. 83, N 10. P. 10D529.
5. von Hellermann M. [et al.]. Simulation of Spectra Code (SOS) for ITER Active Beam Spectroscopy. В: Atoms 7.1, 2019. doi: 10.3390/atoms7010030.
6. Geiger B. et al. Progress in modelling fast-ion D-alpha spectra and neutral particle analyzer fluxes using FIDASIM // Plasma Physics and Controlled Fusion, 2020. doi: 10.1088/1361-6587/aba8d7.
7. Stagner L. [et al.]. FIDASIM: A Neutral Beam and Fast-ion Diagnostic Modeling Suite. doi: 10.5281/zenodo.1341369.

УДК 533.953

In-situ методика исследования напряжений в вольфрамовой пластине, возникающих в результате термического удара

**Д.Е. Черепанов^{1,2}, А.С. Аракчеев^{1,2,3}, А.В. Бурдаков^{1,3}, И.В. Кандауров¹, А.А. Касатов^{1,2}, В.А. Попов¹,
А.А. Руктуев^{1,3}, А.А. Васильев^{1,2}, Л.Н. Вячеславов^{1,2}**

¹Институт ядерной физики им. Будкера СО РАН

²Новосибирский государственный университет

³Новосибирский государственный технический университет

Эрозия вольфрамовых пластин дивертора токамака ИТЭР, вызванная переходными тепловыми нагрузками, является одной из ключевых проблем проекта. Даже в случае использования активных систем для подавления разрушительного воздействия на пластины и поддержания температуры пластин ниже точки плавления их приповерхностный слой будет быстро нагреваться. Тепловая деформация диверторных пластин, возникновение остаточных напряжений в приповерхностном слое будут приводить к растрескиванию обращенной к плазме поверхности. Для изучения процесса повреждения металла была разработана диагностическая система, которая позволяет бесконтактным и неразрушающим методом *in-situ* наблюдать напряжения в вольфрамовых пластинах, подвергающихся термическому удару.

Принцип работы системы состоит в регистрации изменения размера лазерного пучка, отражаемого от полированной до зеркального блеска поверхности образца, обратной к нагреваемой. Исходя из малости изгиба, можно считать, что пластина изгибается в сектор сферы. Типичный пример динамики изгиба показан на рис. 1.

На установке ВЕТА [1, 2] ИЯФ СО РАН с использованием описанной системы вместе с комплексом диагностик для регистрации температуры образца и контроля эрозии облучаемой поверхности был проведен ряд экспериментов по изучению динамики изгиба пластин из вольфрама в ходе серии термических ударов разной интенсивности. В ходе этих экспериментов передняя сторона пластины нагревалась электронным пучком длительностью 0.15–1 мс, который имел гауссово распределение с

полушириной 20 мм и создавал тепловой поток до 1.3 ГВт / м². Результаты экспериментов показали качественно ожидаемый процесс изгиба пластины, а также хорошее согласие с теоретической моделью. Это доказывает перспективность описанного в работе метода для исследования остаточных напряжений в металлическом образце после импульсного нагрева его поверхности.

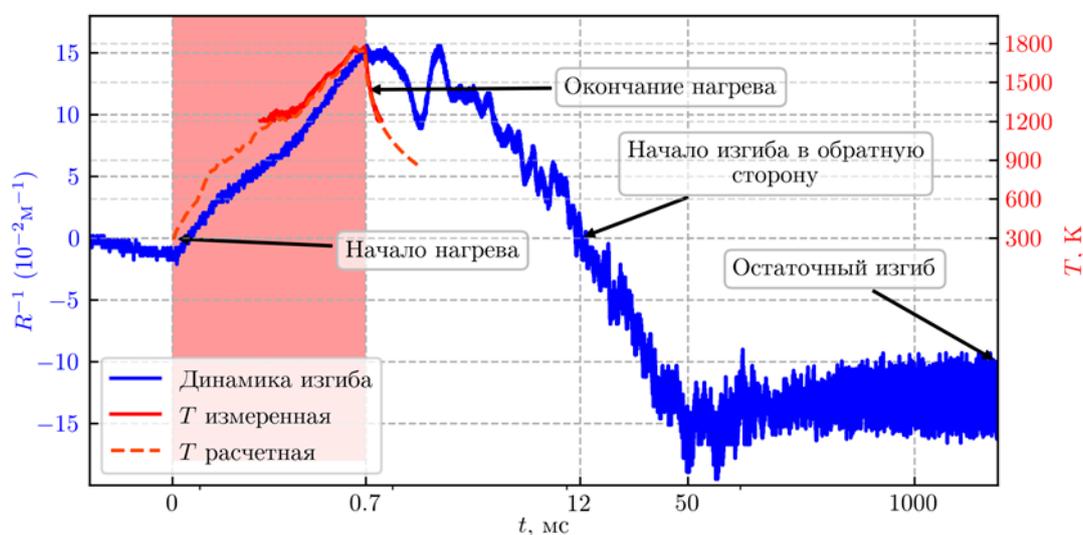


Рис. 1. Динамика изгиба вольфрамовой пластины 25x25x4 мм. T – температура, t – время, R – радиус кривизны

Литература

1. Vyacheslavo L.N. [et al.]. Diagnostics of the dynamics of material damage by thermal shocks with the intensity possible in the ITER divertor // Phys. Scripta. 2018. V. 93, N 035602.
2. Vyacheslavov L.N. [et al.]. In-situ study of the processes of damage to the tungsten surface under transient heat loads possible in ITER // Journal of Nucl. Matter. 2021. V. 544, N 152669.

УДК 533.9.072

Исследование термической деформации пластин при импульсном нагреве

*Н. В. Давыдов^{1,2}, А. С. Аракчеев², А.А. Васильев², Л.Н. Вячеславов², И.В. Кандауров²,
А.А. Касатов^{1,2}, Д.Е. Черепанов²*

¹Новосибирский государственный университет

²Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН

Вольфрамовый дивертор ИТЕР будет подвержен воздействию значительной тепловой нагрузки. Из-за бомбардировки покидающими термоядерную плазму частицами температура поверхности его пластин будет повышаться, что приведет к тепловому расширению материала. В связи с этим в пластинах будут появляться механические напряжения. В случае нагрева достаточно тонких пластин, они в результате будут изгибаться. Этот эффект вряд ли будет значимым для реальных диверторов, но может использоваться для диагностики деформаций и напряжений. Теоретическое исследование данного процесса необходимо для лучшего понимания поведения материала, предсказания долгосрочных последствий воздействия тепловой нагрузки и долговечности дивертора.

В рамках приведенной работы рассматривалось поведение круглой пластины под действием тепловой нагрузки, описываемое уравнением Кирхгофа–Лява [1, 2]:

$$\Delta^2 W + \frac{\rho h}{D} \frac{\partial^2 W}{\partial t^2} = - \frac{1}{(1-\sigma)D} \Delta M_T(t, r),$$

где W – прогиб пластины, ρ – плотность материала пластины, h – толщина пластины, σ – коэффициент Пуассона, $D = \frac{Eh^3}{12(1-\sigma^2)}$ (E – модуль Юнга), M_T – момент внутренних упругих сил, вызванный тепловым расширением. Решение искалось методом Фурье для различных краевых условий.

В результате получена динамика поведения абсолютно упругой пластины при импульсном тепловом воздействии на ее поверхность. Для функций теплового момента, характерное время изменения которых близко к периоду основной гармонике пластины, развиваются колебания с данным периодом, что также наблюдалось в эксперименте. Результат моделирования будет сравниваться с экспериментальными данными с установки ВЕТА для определения роли возбуждаемых нагревом упругих колебаний в деформации пластины.

Кроме динамического моделирования проводились расчёты статических напряжённо-деформированных состояний пластины во время и после мощного импульсного нагрева. Этот случай соответствует быстро затухающим колебаниям. Основа модели пластичности была взята из работы [3] и дополнена экспоненциальной релаксацией пластической деформации с задаваемым характерным временем. Экспериментальные результаты оказались между результатами численных расчётов для бесконечно быстрой и бесконечно медленной пластической деформации. Видимо, для корректного описания деформаций и напряжений при мощном импульсном нагреве длительностью от 100 мкс до 1 мс требуется учёт конечной скорости пластической деформации.

Литература

1. *Krauthammer T., Ventsel E.* Thin Plates and Shells: Theory: Analysis, and Applications. New York : Marcel Dekker, Inc, 2001. 666 p.
2. *Eslami M.R., Sumi N., Noda N., Tanigawa Y., Ignaczak J., Hetnarski R.B.* Theory of Elasticity and Thermal Stresses: Explanations, Problems and Solutions. Dordrecht : Springer Dordrecht, 2013. 789 p.
3. *Arakcheev A.S., Skovorodin D.I., Burdakov A.V. [et al.].* Calculation of cracking under pulsed heat loads in tungsten manufactured according to ITER specifications // J. Nucl. Mater. 2015. V. 467. P. 165–171.

УДК 533.9.08

Измерение потенциала плазмы в газодинамической ловушке методом доплеровской спектроскопии

А.В. Сандомирский^{1,2}, А.А. Лизунов^{1,2}

¹Новосибирский национальный исследовательский государственный университет

²Институт ядерной физики СО РАН им. Г.И. Будкера

Измерение электростатического потенциала плазмы в линейных магнитных ловушках важно для изучения процессов продольного переноса частиц и энергии. Именно уменьшение продольных потерь является критическим условием осуществления УТС в открытой ловушке. В данной работе был использован спектроскопический метод, который имеет ряд преимуществ по сравнению с альтернативными.

Эксперименты проводились в газодинамической ловушке (ГДЛ), которая представляет собой линейную систему для удержания плазмы с аксиально-симметричной конфигурацией магнитного поля. При создании и нагреве плазмы в ГДЛ формируется положительный электростатический потенциал, называемый амбиполярным, спадающий вдоль каждой силовой линии от максимума в центре до нуля на стенке. Такой потенциал определяется квазинейтральностью плазмы в каждой точке, а также равенством продольных токов электронов и ионов на торцевую стенку. Потенциал формирует барьер для покидающих ловушку электронов, а также ускоряет ионы, вытекающие в потоке плазмы через магнитную пробку.

В основе метода диагностики использовался эффект Доплера, основанный на изменении регистрируемой длины волны вследствие движения источника излучения относительно детектора. Чтобы конвертировать ускоренные ионы плазмы в возбуждённые атомы с последующим излучением света, использовалась водородная газовая мишень. Излучение при перезарядке на мишени собиралось оптической системой, поступало в спектрометр схемы Черни–Тёрнера с дифракционной решёткой и регистрировалось быстродействующей ПЗС-камерой. Перед измерениями в плазме ГДЛ была произведена калибровка спектральной дисперсии и аппаратной функции прибора при помощи лабораторных газоразрядных ламп H и Ne.

Были проведены измерения потенциала и ионной температуры различных компонент плазмы: основной (водородной и дейтериевой) и примеси гелия. В работе представлены спектры излучения

линий Н- α (656.28 нм) He-I (667.8 нм). Впервые были проведены измерения пространственного профиля амбиполярного потенциала в ГДЛ. Построена зависимость потенциала плазмы от электронной температуры.

Литература

1. *Ivanov A.A., Prikhodko V. V. Gas-dynamic trap: an overview of the concept and experimental results // Plasma Physics and Controlled Fusion. 2013. V. 55, N 6. P. 063001.*

УДК 533.922

Моделирование отклика алмазных детекторов в смешанном поле нейтронов и гамма-квантов

*П.А. Ревякин^{1,2}, Д.А. Кумпилов^{1,2}, Р.Н. Родионов²,
С.А. Мещанинов², Т.М. Кормилицын^{1,2}, Г.Е. Немцев²*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Частное учреждение «ИТЭР-Центр»

В настоящее время разрабатываются полупроводниковые алмазные детекторы для измерения потоков нейтронов на термоядерных установках. В частности, на токамаке ИТЭР планируется использовать алмазные детекторы в диагностических системах, предназначенных для измерения профиля нейтронного источника – «ВНК» и «РНК» (вертикальная и радиальная нейтронные камеры).

Быстрые нейтроны, образующиеся в результате протекания дейтерий-дейтерий (ДД) и дейтерий-третий (ДТ) реакций в плазме, регистрируются алмазным детектором через взаимодействие нейтронов с ядрами углерода. При измерении нейтронов всегда стоит задача разделения отклика нейтронов и сопутствующего гамма-излучения, возникающего в результате (n, γ)-реакций и активации окружающих материалов. В случае регистрации ДТ нейтронов на углероде наблюдается реакция $^{12}\text{C}(n, \alpha)^9\text{Be}$ – пороговая реакция с $E_{thres} \approx 5$ МэВ, в которой происходит полное поглощение энергии нейтрона. В амплитудном спектре, соответствующем данной реакции, образуется отдельно стоящий пик, по которому можно напрямую измерять плотность потока ДТ-нейтронов.

Сигналы, вызванные взаимодействием ДД-нейтронов и гамма-излучения с алмазом, находятся в одном диапазоне амплитуд, что существенно затрудняет измерение потока ДД-нейтронов. Однако у быстрых электронов, возникающих под действием гамма-излучения, длина пробега сильно больше, чем у ядер отдачи, образующихся в реакциях взаимодействия нейтронов с ядрами углерода, поэтому чем меньше кристалл алмаза, тем меньше максимальная амплитуда сигнала, создаваемого гамма-излучением, что открывает дополнительные возможности спектрометрии ДД-нейтронов.

В докладе приведены результаты моделирования отклика алмазных детекторов на излучение ДД нейтронного генератора. Для нейтронов амплитудный спектр алмазного детектора получен с помощью аналитически рассчитанной функции отклика, а для фотонов – с помощью расчета методом Монте-Карло. Получена зависимость формы амплитудного спектра при облучении нейтронами и гамма-излучением от геометрических параметров кристалла. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментом по облучению алмазных детекторов разных размеров на нейтронном генераторе.

Работа выполнена в рамках государственного контракта Н.4а.241.19.21.1038 от 11 мая 2021 года: «Разработка, опытное изготовление, испытание и подготовка к поставке специального оборудования в обеспечение выполнения российских обязательств по проекту ИТЭР в 2021 году».

Влияние плотности газовой завесы на экранирование вольфрамовой мишени при воздействии на неё мощного потока водородной плазмы

С.Д. Лиджигорьев^{1,2}, Д.А. Топорков^{1,2}, В.В. Гаврилов¹, И.М. Позняк^{1,2}, В.А. Костюшин¹, Д.А. Бурмистров^{1,3}, А.В. Пушина^{1,4}

¹Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований

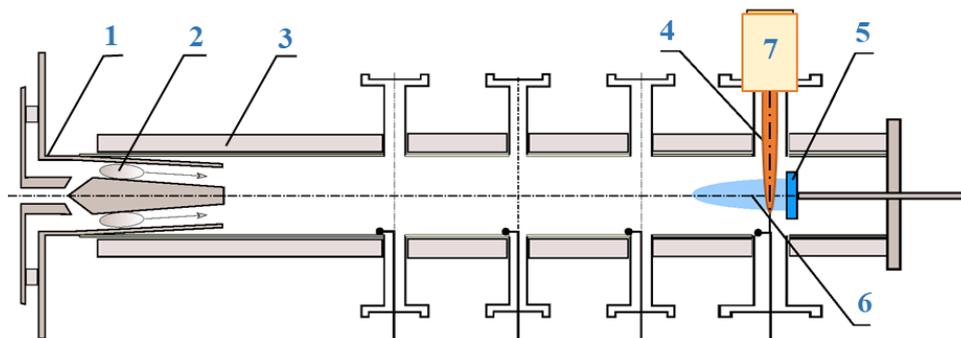
²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Национальный исследовательский университет «МЭИ»

⁴Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Исследование взаимодействия плазмы с конструкционными материалами термоядерных установок является одной из наиболее актуальных задач при реализации управляемого термоядерного синтеза. Эрозия защитных покрытий может сопровождаться поступлением тяжелых примесей в горячую плазму, что повлечет за собой сокращение времени её жизни. Одним из возможных способов защиты обращенных к плазме материалов является напуск газа перед их поверхностью (газовая завеса). Так, например, в настоящий момент разрабатывается концепция диссипативного дивертора ИТЭР, в рамках которой предполагается, что энергия, поступающая из плазменного шнура в пристеночный слой, будет рассеиваться в виде излучения примесей азота или неона [1, 2]. Взаимодействие плазмы с газовой средой также может быть перспективным направлением для создания мощных источников мягкого рентгеновского излучения на базе импульсных плазменных ускорителей [3]. Цель данной работы – изучить влияние плотности газовой завесы, создаваемой перед поверхностью вольфрамовой мишени, на её экранировку при воздействии мощного потока водородной плазмы [4, 5].

На рис. 1 представлена схема эксперимента на установке МКТ (ТРИНИТИ). Импульсный плазменный ускоритель (1) создает водородный плазменный поток (2), скорость которого составляет $(4\div 6) \times 10^7$ см/с, а энергосодержание доходит до 40 кДж. Поток движется в направлении мишени (5) в продольном магнитном поле с индукцией до 2 Тл, создаваемом соленоидами (3). Плотность энергии в налетающем на мишень потоке варьируется в диапазоне $40\div 400$ Дж/см² в зависимости от напряжения на конденсаторной батарее. Газовая завеса азота (4) перед мишенью формируется импульсным газовым клапаном (7) с плоским соплом Лавала. Плотность частиц в завесе определяется давлением газа в подклапанном объеме. Толщина газовой завесы вдоль направления движения плазменного потока составляет ≈ 5 см, а ширина вдоль поверхности мишени ≈ 15 см.



1 – импульсный плазменный ускоритель, 2 – ускоряемая плазма, 3 – соленоиды, 4 – газовая завеса, 5 – твердотельная мишень, 6 – мишенная плазма, 7 – газовый клапан

Рис. 1. Схема эксперимента на установке МКТ

Мягкое рентгеновское излучение плазмы, образующейся при взаимодействии водородного плазменного потока с вольфрамовой мишенью и газовой завесой, регистрировалось многокадровой МКП-камерой с экспозицией кадров 40 нс. Энергия, поглощаемая мишенью, измерялась многоканальным термометрическим калориметром.

В результате проведенных экспериментов была получена зависимость плотности поглощенной мишенью энергии от плотности частиц в газовой завесе. Согласно полученным данным при снижении максимальной плотности струи с $2 \cdot 10^{17}$ 1/см³ до $5 \cdot 10^{16}$ 1/см³ наблюдалось монотонное повышение максимальной плотности поглощенной мишенью энергии с 19 Дж/см² до 47 Дж/см². Путем численного

моделирования определена предельная тепловая нагрузка на поверхность мишени $Q = 37 \text{ Дж/см}^2$, выше которой на поверхности достигается температура кипения вольфрама – 5828 К.

На рис. 2 представлены результаты высокоскоростной съемки в диапазоне мягкого рентгеновского излучения. Видно, что при наличии газовой завесы область свечения вольфрамовых примесей локализована вблизи поверхности мишени. Таким образом, установлено, что газовая завеса препятствует распространению вольфрамовых примесей вдоль силовых линий магнитного поля, даже при $Q > 37 \text{ Дж/см}^2$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках проектов № 18-29-21013 и № 20-21-00153.

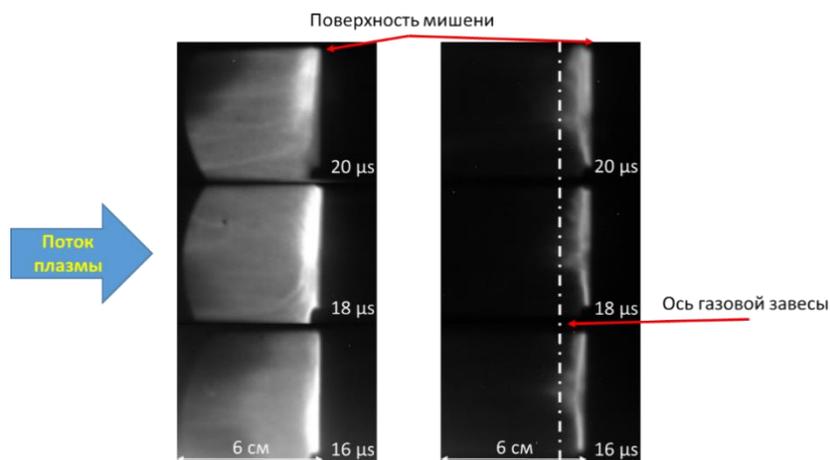


Рис. 2. Динамика мишени плазмы при отсутствии (слева, $Q = 47 \text{ Дж/см}^2$) и при наличии (справа, $Q = 41 \text{ Дж/см}^2$) газовой завесы

Литература

1. Пшенин А.А., Кукушкин А.С., Крашенинников С.И. Влияние поперечного переноса в диверторной области на излучение инжектируемой примеси и переход в режим детачмента // Физика плазмы. 2020. Т. 46, № 6. С. 483.
2. Lehnen M. et al. J. Nucl. Mater. 2015. V. 463. P. 39.
3. Gavrilov V. V., Zhitlukhin A.M., Kochnev D.M., Kostyushin V. A., Poznyak I.M., Pikuz S.A., Ryazantsev S.N., Skobelev I.YU., Toporkov D.A. Soft X-ray radiation sources based on high-energy plasma flow thermalization with gas and solid-state targets // 7th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE-2020 online). Tomsk, 2020. P. 193.
4. Лиджигорьяев С.Д., Костюшин В.А., Позняк И.М., Сафронов В.М., Топорков Д.А. Влияние инжекции азота на экранирование вольфрамовой мишени при воздействии мощного потока водородной плазмы // Труды 63-й Всероссийской научной конференции МФТИ. Фунд. и прикл. физика. Москва : МФТИ, 2020. С. 22-24.
5. Gavrilov V. V., Zhitlukhin A.M., Kochnev D.M., Kostyushin V. A., Lidzhigoriaev S.Dl., Poznyak I.M., Pikuz S.A., Ryazantsev S.N., Skobelev I.YU., Toporkov D.A. Shielding of the tungsten target exposed to the high-energy hydrogen plasma flow by gas injection // 47th EPS Conference on Plasma Physics. 2021. <http://ocs.ciemat.es/EPS2021pap/pdf/P4.2011.pdf>

УДК 533.924

Модификация поверхности вольфрама при его облучении импульсными потоками дейтериевой плазмы с примесью инертных газов

А.А. Сергеев, Д.В. Коваленко, К.М. Гуторов, В.А. Барсуку, С.Е. Панин, М.В. Петраков

Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований

Вопрос долговечности материалов, которые будут применяться в будущих токамаках реакторного масштаба, до сих пор является крайне значимым. В первую очередь это связано с тем, что ожидаемые плазменно-тепловые нагрузки на обращенные к плазме элементы (ОПЭ) первой стенки и дивертора, возникающие при переходных плазменных процессах (ELM-события и срывы), будут превосходить пороги плавления и даже кипения любого материала. Для смягчения таких нагрузок планируется

использовать метод, основанный на инжекции в плазму токамака некоторого количества инертного газа (гелий, аргон, неон) [1]. Однако следует учесть, что в этом случае потоки плазмы, поступающие на поверхность ОПЭ токамака, будут содержать примеси указанных газов. Наличие таких примесей может влиять как на процессы модификации и эрозии защитных покрытий ОПЭ, так и на захват трития в них.

В данной работе представлены данные по модификации вольфрама, вольфрама с «пухом» и вольфрамового сплава W-Y-Cr после облучения импульсными потоками плазмы при использовании в качестве плазмообразующего газа дейтерия и дейтерия с добавлением примесей гелия, аргона и неона. Вольфрам выбран в качестве материала защитных покрытий дивертора ИТЭР. При этом известно, что наличие гелия в приповерхностной плазме при определенных условиях может приводить к тому, что на поверхности вольфрама образуется наноструктура – вольфрамовый «пух» [2]. W-Y-Cr («умный» сплав) является одним из перспективных материалов для использования в качестве обращенного к плазме материала первой стенки будущих токамаков реакторного масштаба, включая DEMO [3]. Его отличительной особенностью является повышенная стойкость к окислению в случае аварийного выброса воды в камеру, а также захвату трития, компонента термоядерной смеси.

Облучение образцов материалов импульсными потоками плазмы проводилось на квазистационарном сильноточном плазменном ускорителе («КСПУ-Т»), расположенном в АО «ГНЦ РФ ТРИ-НИТИ», г. Троицк. Выбор данной установки обусловлен тем, что ускоритель позволяет имитировать условия переходных плазменных процессов ИТЭР по таким параметрам, как тепловая нагрузка на поверхность образца Q (до 5 МДж/м²) и длительность импульса τ (до 1 мс) [4].

В работе использовались две марки поликристаллического вольфрама: В-МП 99,98% производства АО «Полема», Россия и вольфрам 99,97% производства Plansee AG, Австрия. Создание «пуха» проходило на установке с индуктивно-связанной плазмой в НИЯУ МИФИ, описанной в работе [5]. Образцы имели размер 10×10×3 мм³ или 12×12×3 мм³. Длительность импульса облучения τ равнялась 1 мс, что соответствует условиям импульсных тепловых нагрузок, актуальных для краевых локализованных мод (ELM) в ИТЭР и DEMO реакторах [6]. Количество импульсов N составляло 1 и 10. В качестве плазмообразующего газа использовались дейтрий, а также дейтерий с добавками гелия (10%), аргона (1%), неона (1%) и их комбинации. Тепловая нагрузка на поверхность вольфрамовых образцов Q равнялась 0,7 МДж/м², для «умного» сплава облучение проходило при $Q = 0,5$ и 0,7 МДж/м². Указанные величины лежат ниже порога плавления как для вольфрама, так и для «умного» сплава.

Для исследования модификации поверхности вольфрама были получены СЭМ-изображения образцов до и после облучения. Показано, что облучение как дейтериевой, так и дейтериево-гелиевой плазмой приводило к расслоению материала. Облучение дейтериевой плазмой с примесями неона и аргона незначительно влияло на состояние поверхности вольфрама при 10 импульсах.

В случае вольфрама с «пухом» исходные нано-волокна агломерируют в более толстые волокна в результате плавления и частично удаляются с ростом числа импульсов, что соответствует данным, полученным в [5]. При добавлении примесей аргона и неона в дейтериевую плазму и облучения вольфрама с «пухом», существенное изменение «пуха» наблюдалось в случае примеси аргона. Вероятно, это связано с тем, что облучение более тяжелыми ионами аргона привело к распылению «пуха».

Часть вольфрамовых образцов подвергалась двум последовательным идентичным циклам обработки. Каждый цикл заключался в выращивании «пуха» на образцах и последующем облучении импульсной плазмой (10 импульсов). Цель данных экспериментов – оценить влияние повторных тепловых нагрузок на рост пуха и модификацию поверхности. После первого цикла обработки волокна «пуха» агломерировали и частично оплавившись. При повторном выращивании «пуха» его структура существенно отличалась от первоначальной – на поверхности преобладали агломерировавшие волокна. Кроме того, было обнаружено, что в трещинах, образовавшихся на поверхности образцов после первой серии импульсов, также происходит образование «пуха», при этом его структура аналогична первоначальной. Повторное облучение плазмой приводит к уплотнению нановолокон «пуха» на поверхности, при этом «пух» внутри трещин не претерпевает значительных изменений.

Из четырех образцов вольфрамового сплава W-Y-Cr два образца разрушились. Причиной могло оказаться наличие микродефектов в исходных образцах. На остальных образцах после облучения обнаружены трещины и сколы на кромках. Исходя из этого, можно говорить о том, что выбранные нагрузки являются критическими для данного материала.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (РНФ) № 20-12-00203.

Литература

1. *Lehnen M., et al.* Disruptions in ITER and strategies for their control and mitigation // *Journal of Nuclear Materials*. 2015. V. 463, P. 39–48, ISSN 0022-3115.
2. *Ogorodnikova, O. V., Schwarz-Selinger T., Sugiyama, K., & Alimov, V. K.* Deuterium retention in tungsten exposed to low-energy pure and helium-seeded deuterium plasmas // *Journal of Applied Physics*. 2011. 109(1). 013309.
3. *Schmitz, J., et al.* Argon-seeded plasma exposure and oxidation performance of tungsten-chromium-yttrium smart alloys // *Tungsten 1*. 2019. P. 159–168.
4. *Коваленко Д.В., Климов Н.С., Житлухин А.М., Музыченко А.Д., Подковыров В.Л., Сафронов В.М., Ярошевская А.Д.* Получение потоков аргоновой плазмы и преобразование их энергии в излучение на установке КСПУ-Т для моделирования радиационных нагрузок, характерных для ослабленного срыва ИТЭР // *Вопросы атомной науки и техники. Серия: Термоядерный синтез*. 2014. Т. 37, № 4. С. 39–48.
5. *Ogorodnikova, O. V., Klimov, K. S., Poskakalov, A. G., Kaziev, A. V., Kharkov, M. M., Efimov, V. S., Tokitani, M.* Deuterium and helium retention in W with and without He-induced W «fuzz» exposed to pulsed high-temperature deuterium plasma // *Journal of Nuclear Materials*. 2019. V. 515. P. 150–159.
6. *Y. Igitkhanov, B. Bazylev.* Modeling of DEMO PFC Erosion Due to ELM Impact // *IEEE Transactions on Plasma Science*. 2014. V. 42, № 9. P. 2284–2290.

УДК 533.9.08

Диагностический комплекс для измерения нейтронного излучения термоядерной DD плазмы на установке МК-200

*А.А. Жарова¹, Д.А. Топорков¹, В.А. Костюшин¹,
И.М. Позняк^{1,2}, С.Д. Лиджигорьев¹, Д.А. Бурмистров¹*

¹Государственный научный центр Российской Федерации
Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время наиболее перспективным и проработанным термоядерным проектом токамак-реактора является международный экспериментальный термоядерный реактор (ИТЭР). Горение термоядерной плазмы будет сопровождаться мощным нейтронным излучением, воздействующим на материалы вакуумной камеры. **Указан недопустимый источник.** При этом становится актуальной задача подбора и исследования конструкционных материалов под действием термоядерных нейтронов.

Для достижения этих целей требуется создать лабораторный источник нейтронов МэВ-го диапазона энергий с соответствующими характеристиками. Кроме решения термоядерных проблем, мощный нейтронный генератор может найти применения в фундаментальных исследованиях физики твердого тела, переработке радиоактивных отходов, радиохимии. Таким образом, продвижение термоядерной энергетики невозможно без создания мощных нейтронных источников.

Один из способов получения термоядерных нейтронов – это столкновение высокоскоростных DD и DT плазменных потоков, испускаемых импульсными плазменными ускорителями.

В настоящее время создание нейтронного источника ведется в ГНЦ РФ ТРИНИТИ, на базе установки МК-200, состоящей из импульсного ускорителя, камеры взаимодействия (плазмотрода) и мишенной камеры (опционально) (рис. 1). Она способна генерировать потоки плазмы с энергией внешнего направленного движения ионов в несколько кэВ и общим энергосодержанием до 100 кДж и магнитным полем до 2 Тл.

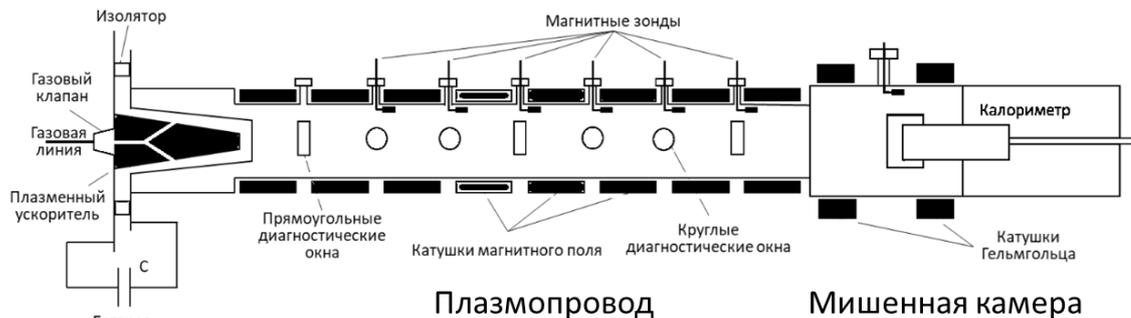


Рис. 1. Схема установки МК-200 (ТРИНИТИ)

Целью данной работы являлось создание диагностического комплекса для измерения полного выхода, энергетического спектра, интенсивности и диаграммы направленности нейтронного излучения. Для этого использовались сцинтилляционные детекторы на основе кристаллов стиблена и партерфенила в полистироле, а также активационные детекторы.

Полный нейтронный выход измеряли с помощью детектора активационного типа, который представляет собой блок замедлителя из парафина размером $190 \times 480 \times 220$ мм³, внутрь которого помещались четыре счетчика Гейгера СТС-6, обернутых серебряной фольгой толщиной 0,25 мм. Принцип действия детектора основан на активации изотопа серебра Ag^{109} тепловыми нейтронами с образованием β -активных изотопов Ag^{110} , период полураспада которых составляет 24,5 с. Процесс распада Ag^{110} регистрируется счетчиками Гейгера. Калибровка детекторов осуществлялась по методике, изложенной в работе **Указан недопустимый источник.**

Для измерения геометрических размеров зоны излучения источника нейтронов разработаны 9 малогабаритных активационных детекторов. В качестве замедлителя в этих детекторах используется полиэтилен. В 6 из них используется по 6 счетчиков Гейгера марки СБМ20-1, обернутых серебряной фольгой, толщиной 0,25 мм (рис. 2а). Остальные детекторы собраны на основе СБТ-10А, состоящего из 10 счетчиков Гейгера, блока замедлителя и пластинки серебра или индия (рис. 2б). В результате активации последнего образуется β -активный изотоп In^{116} . β -распад изотопа In^{116} идет по двум каналам. Период полураспада первого канала составляет 14,1 с, второго – 55 мин. Для увеличения чувствительности счетчики Гейгера во всех детекторах соединены параллельно.

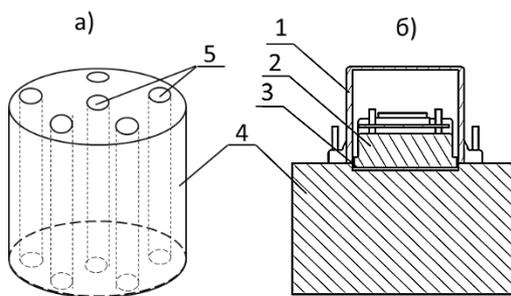


Рис. 2. Активационные детекторы на основе счетчиков СБМ20-1 (а) и СБТ-10А (б), где 1 – крышка, 2 – счетчик СБТ-10А, 3 – пластинка металла (индия или серебра), 4 – замедлитель (полиэтилен), 5 – счетчики СБМ20-1

В ходе экспериментов по откликам сцинтилляционных детекторов измерены интенсивности нейтронного излучения в зависимости от рабочего напряжения на емкостной батарее, питающей плазменный ускоритель, и количества газа в его межэлектродном пространстве.

Согласно полученным данным, полный нейтронный выход составляет $\sim 10^7$ нейтронов за импульс.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках проектов № 18-29-21013 и № 18-29-21007.

Литература

1. *Кругляков Э.П.* Мощные генераторы нейтронов // Прикладная механика и техническая физика. Т. 38, № 4. 1997.
2. *Данько С.А., Кингсен С.С., Тельковская О.В., Алексеев А.Г., Бритвич Г.И.* Активационный детектор нейтронов для импульсной DD-реакции синтеза // Вопросы атомной науки и техники. Серия термоядерный синтез. № 1. 2012. С. 23–30.

Динамика процесса модификации рельефа металлического образца под действием фотонного нагрева

*М.В. Петраков, А.А. Карташева, Д.В. Коваленко, А.А. Сергеечев,
В.Л. Подковыров, К.М. Гуторов*

Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований

Цель данной работы заключается в исследовании процессов модификации поверхности металлов под действием фотонного нагрева. Изучение динамики процессов формирования волнообразной структуры поверхности, шероховатостей и образования трещин поможет ответить на ключевые вопросы разработки защитных покрытий вакуумной камеры термоядерных установок, где остро стоит проблема эрозии обращенных к плазме материалов под действием мощных потоков плазмы и излучения.

В данной работе образцы алюминия и коррозионностойкой стали были испытаны при фотонных тепловых нагрузках, соответствующих условиям во время ослабленных срывов ИТЭР [1]. Для обеспечения фотонного нагрева был использован квазистационарный плазменный ускоритель (КСПУ) [2]. При торможении потока плазмы водорода на твердотельной мишени значительная часть его энергии преобразуется в энергию фотонов, излучаемых приповерхностным слоем плотной плазмы. Высокая плотность фотонной энергии достигалась на образцах, находящихся вне потока плазмы, но обращенных облучаемой поверхностью к излучающей мишени рис. 1.

В работах [3–5] было показано, что воздействие потока фотонов на образцы обращенных к плазме материалов ИТЭР (бериллий, сталь 316L(N)-IG) приводит к образованию регулярной волнообразной поверхности с горбами и впадинами. Динамика процесса модификации поверхности образцов под действием фотонного нагрева впервые зарегистрирована в данной работе. Изучение процессов развития рельефа проводилось с помощью видеокамеры Phantom с размером кадра 256*256 пикселей и временным разрешением 200 000 к/с. Высокоскоростная регистрация позволила зафиксировать момент начала плавления и оценить значение скорости движения расплава, равное 5.5 м/с. Кроме того, удалось зарегистрировать процесс формирования волнообразного рельефа.

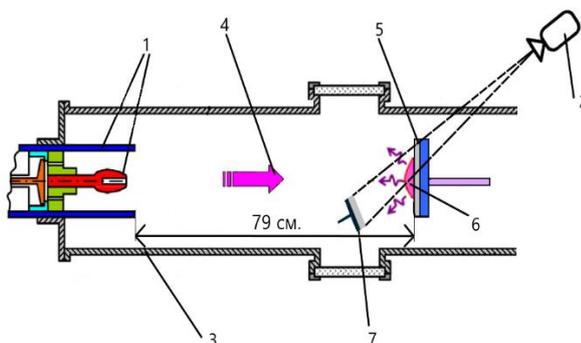


Рис. 1. Схема эксперимента на КСПУ: 1 – электроды, 2 – видеокамера Phantom, 3 – вакуумная камера, 4 – направление плазменного потока, 5 – оргстеклянная мишень, 6 – фотонное излучение, 7 – металлический образец

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Госкорпорации «Росатом» в рамках научного проекта № 20-21-00153.

Литература

1. *Riccardi B. et al.* Preliminary results of the experimental study of PFCs exposure to ELMs-like transient loads followed by high heat flux thermal fatigue // *Fusion engineering and design*. 2011. V. 86. N 9–11. P. 1665–1668.
2. *Коваленко Д.В., [и др.]*. Термоядерный синтез // *ВАНТ*. Сер. вып. 4. 2014. 39–48 с.
3. *Klimov N.S. et al.* Plasma facing materials performance under ITER-relevant mitigated disruption photonic heat loads // *Journal of Nuclear Materials*. 463. 2015. P. 61–65.

4. Klimov N. S. [et al.]. Stainless steel performance under ITER-relevant mitigated disruption photonic heat loads // Journal of Nuclear Materials. 2013. V. 438. P. S241–S245.
5. Будаев В.П., [и др.]. Рекристаллизация и изменение рельефа поверхности стали под воздействием излучения в плазменных разрядах большой мощности. М.: ФГУП ГИЦ «Гроцкий институт инновационных и термоядерных исследований». 2013.

УДК 544.228

Синтез среднетемпературных термоэлектрических материалов на основе силицидов магния

А.А. Рожина

¹Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

²АО «Гиредмет»

В последние дни термоэлектрические материалы зарекомендовали себя как перспективные источники альтернативной энергетики. Принцип действия термоэлектрического генератора основан на эффектах Пельтье и Зеебека. Оценочный параметр термоэлектрика – добротность, она является безразмерной величиной, зависящей исключительно от физических свойств материала, прямо пропорциональна произведению электропроводности и термоэдс, а также обратно пропорциональна теплопроводности.

Одним из самых перспективных в области средних температур (от комнатной до 350 °С) является *n*-тип соединений силицида Mg (Mg_2Si) [1]. Однако получение соединения осложняется из-за реакционной способности, летучести и склонности Mg к окислению. Решением данного вопроса может стать твердый раствор силицида магния и силицида олова.

Цель данной научной работы – получение однофазного образца твердого раствора $Mg_2Sn_{0.6}Si_{0.4}$. В данной работе объемные образцы твердых растворов Mg_2Si - Mg_2Sn получали методом искрового плазменного спекания при температуре 720° С в течение 10 мин. Порошки силицида магния *n*-типа $Mg_2Sn_{0.6}Si_{0.4}$ исследовались после разных режимов синтеза: спекание материала на воздухе при температуре 900° С, синтез в вакууме при температуре 1000° С, спекание магния при температуре 1200° С при избыточном давлении инертного газа. Затем образцы подвергали гомогенизирующему отжигу при температуре 500° С в течение 100 часов.

Результаты показывают, что твердый раствор $Mg_2Sn_{0.6}Si_{0.4}$ может быть получен при синтезе порошков при температуре 1200° С в инертной среде с последующим гомогенизирующим отжигом при температуре 500° С в течение 100 часов. Изучение структуры было проведено методом порошковой рентгеновской дифракции. Показано, что твердый раствор $Mg_2Sn_{0.6}Si_{0.4}$ может быть получен при синтезе порошков при температуре 1200° С в инертной среде с последующим гомогенизирующим отжигом при температуре 500° С в течение 100 часов.

Литература

1. Cahana M. Bismuth doping of induction furnace synthesized Mg_2Si , Mg_2Sn and Mg_2Ge thermoelectric compounds / M. Cahanaa, Y. Gelbstei // Intermetallics. 2020. V. 120. 106767.

Секция «Фундаментальные взаимодействия и космология»

УДК 539.1

Анализ влияния вклада аннигиляционных диаграмм и вклада больших расстояний на распад $B^+ \rightarrow \pi^+ l^+ l^-$

А.Я. Пархоменко, И.М. Парнова

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Физика адронов, содержащих прелестный кварк, играет фундаментальную роль как для различных тестов Стандартной модели, так и для поисков возможной «Новой физики». Редкие полулептонные распады B -мезонов, идущие за счет нейтральных $b \rightarrow s$ и $b \rightarrow d$ токов с изменением аромата, могут быть использованы для строгой проверки правильности Стандартной модели в части физики ароматов кварков. В работе рассматривается редкий полулептонный распад $B^+ \rightarrow \pi^+ l^+ l^-$, где $l = \mu, \tau$ – заряженный лептон. Распределение по инвариантной массе мюонной пары и относительная вероятность этого распада вычислены в рамках метода слабых эффективных гамильтонианов. Такой гамильтониан для $b \rightarrow s$ и $b \rightarrow d$ кварковых переходов имеет вид [1]:

$$H_{eff} = -\frac{4G_F}{\sqrt{2}} \left[V_{ib}^* V_{ip} \sum_{i=1}^{10} C_i(\mu) O_i(\mu) + V_{ub}^* V_{up} \sum_{i=1}^2 C_i(\mu) (O_i(\mu) - O_i^{(u)}(\mu)) \right], \quad (1)$$

где G_F – константа Ферми, $p = s, d$ – легкий кварк, задействованный в переходе, $V_{q_1 q_2}$ – элементы матрицы Кабиббо–Кобаяши–Маскавы, $C_i(\mu)$ – коэффициенты Вильсона, определяющие вклад соответствующего оператора $O_i(\mu)$ на масштабе энергий μ [1]. Матричные элементы для перехода $B \rightarrow P$, где P – псевдоскалярный мезон, выражаются через три переходных формфактора $f_{+,0,T}(q^2)$, где $q^2 = (p_B - k)^2$ – квадрат импульса лептонной пары [2].

Выражение для дифференциальной вероятности распада легко вычисляется, однако учет КХД поправок, требующих вычисления двухпетлевых диаграмм, приводит к существенным осложнениям. В рассматриваемом приближении вероятность распада можно записать как [3]:

$$\frac{dBr(B \rightarrow Pl^+ l^-)}{dq^2} = S_p \frac{2G_F^2 \alpha_{em}^2 \tau_B}{3(4\pi)^5 m_B^3} |V_{ib}^* V_{ip}|^2 \lambda^{3/2}(q^2) F^{BP}(q^2) \sqrt{1 - \frac{4m_l^2}{q^2}} \quad (2)$$

$$F^{BP}(q^2) = F_{97}^{BP}(q^2) + F_{10}^{BP}(q^2), \lambda(q^2) = (m_B^2 + m_p^2 - q^2) - 4m_B^2 m_p^2, \quad (3)$$

$$F_{97}^{BP}(q^2) = \left(1 + \frac{2m_l^2}{q^2} \right) \left| C_9^{eff}(q^2) f_+^{BP}(q^2) + \frac{2m_b}{m_B + m_p} C_7^{eff}(q^2) f_T^{BP}(q^2) + L_A^{BP}(q^2) + \Delta C_V^{BP}(q^2) \right|^2, \quad (4)$$

$$F_{10}^{BP}(q^2) = \left(1 - \frac{4m_l^2}{q^2} \right) \left| C_{10}^{eff}(q^2) f_+^{BP}(q^2) \right|^2 + \frac{6m_l^2}{q^2} \frac{m_B^2 - m_p^2}{\lambda(q^2)} \left| C_{10}^{eff}(q^2) f_0^{BP}(q^2) \right|^2, \quad (5)$$

где S_p – изоспиновый множитель от мезона в конечном состоянии, в частности, $S_{\pi^\pm} = 1, S_{\pi^0} = 1/2$, $C_{7,9,10}^{eff}(q^2)$ – эффективные коэффициенты Вильсона, в которых учитываются КХД поправки, $L_A^{BP}(q^2)$ – вклад от аннигиляционных диаграмм [4], $\Delta C_V^{BP}(q^2)$ – вклады больших расстояний от легких векторных мезонов $V = \rho^0, \omega, J/\psi, \psi(2S)$ [5].

Анализ распада $B^+ \rightarrow \pi^+ \mu^+ \mu^-$, учитывающий оба вклада, проведен для двух типов параметризации формфакторов – параметризации Бойда, Гринштейна и Лебеда (БГЛ) [6] и модифицированной

параметризации Бореллея, Каприни и Леллоша (мБКЛ) [7]. Результаты для распределения по инвариантной массе мюонной пары представлены на левом графике на рис. 1. Как можно видеть из этого графика, полученные нами предсказания (прямоугольники зеленого цвета, обозначенные как APP), находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными, полученными коллаборацией LHCb [8] (черные крестики) при учете теоретических и экспериментальных погрешностей. Более того, совместный учет вклада аннигиляционных диаграмм и вкладов от ρ^0 - и ω -резонансов дает лучшее согласие с экспериментальными данными в области малых q^2 по сравнению с [5]. Полученный спектр слабо зависит от выбора параметризации формфакторов.

Анализ распада $B^+ \rightarrow \pi^+ \tau^+ \tau^-$ также проведен для БГЛ и мБКЛ параметризаций. Результаты для распределения по инвариантной массе тауонной пары представлены на правом графике на рис. 1. Значения для полной вероятности распада $B^+ \rightarrow \pi^+ \tau^+ \tau^-$ для различных типов параметризаций согласуются с известным ранее теоретическим предсказанием [9]:

$$Br_{BGL}^{th} = 7.56_{-0.75}^{+1.04} \times 10^{-9}, Br_{mBCL}^{th} = 6.28_{-0.78}^{+0.88} \times 10^{-9}, Br_{[9]}^{th} = (7.00 \pm 0.07) \times 10^{-9}. \quad (6)$$

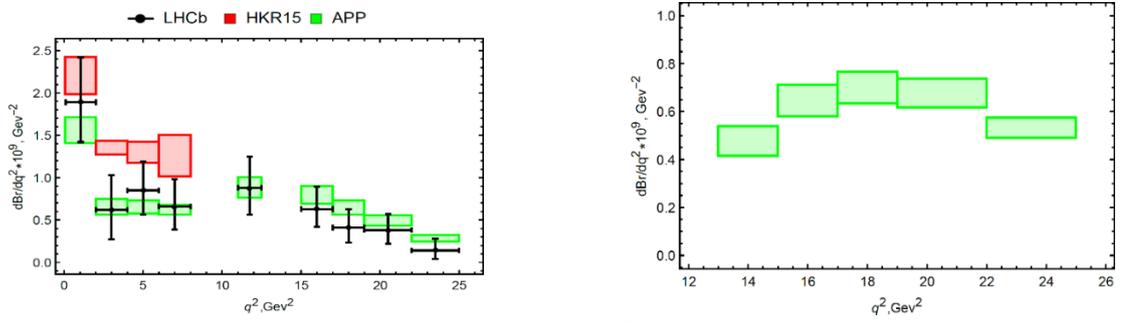


Рис. 1. Дифференциальная вероятность распада, где $l = \mu$ (левый график) и $l = \tau$ (правый график) в бинах по инвариантной массе лептонной пары для БГЛ параметризации. Сплошные красные прямоугольники, обозначенные как HKR15, показывают теоретические предсказания, полученные в [5], прямоугольники зеленого цвета, обозначенные как APP, – предсказания данной работы, крестиками указаны экспериментальные данные коллаборации LHCb [8]

Литература

1. Buchalla G., Buras A.J., Lautenbacher M. E. Weak Decays Beyond Leading Logarithms // ReV. Mod. Phys. 1996. V. 68. P. 1125–1144.
2. Beneke M., Feldmann T. Symmetry-breaking corrections to heavy-to-light B meson form factors at large recoil // Nucl. Phys. B. 2001. V. 592 $B^+ \rightarrow \pi^+ l^+ l^-$. P. 3–34.
3. Ali A., Parkhomenko A.Ya., Rusov A.V. Precise Calculation of the Dilepton Invariant-Mass Spectrum and the Decay Rate in in the SM // Phys. ReV. D. 2014. V. 89. P. 094021.
4. Beneke M., Feldmann T., Seidel D. Exclusive radiative and electroweak and penguin decays at NLO // Eur. Phys. J. C. 2005. V. 41. P. 173–188.
5. Hambrook C., Khodjamirian A., Rusov A. Hadronic effects and observables in decay at large recoil // Phys. ReV. D. 2015. V. 92. P. 074020.
6. Boyd C. G., Grinstein B., Lebed R. F. Constraints on Form Factors for Exclusive Semileptonic Heavy to Light Meson Decays // Phys. ReV. Lett. 1995. V. 74. P. 4603.
7. Leljak D., Melic B., van Dyk D. The form factors from QCD and their impact on // JHEP. 2021. V. 07. P. 036.
8. Aaij R. et al. First measurement of the differential branching fraction and CP asymmetry of the decay // JHEP. 2015. V. 10. P. 034.
9. Faustov R. N., Galkin V. O. Rare and decays in the relativistic quark model // Eur. Phys. J. 2014. V. C74. P. 2911.

Спектаторная материя в столкновениях релятивистских деформированных ядер*Н.А. Козырев^{1,2}, А.О. Светличный^{1,2}, Р.С. Непейвода^{1,2}, И.А. Пиеничнов^{1,2}*¹Московский физико-технический Институт (национальный исследовательский университет)²Институт ядерных исследований РАН

Существует много деформированных ядер, распределения плотности в которых не являются сферически симметричными [1]. Столкновения деформированных ядер ^{129}Xe изучались в эксперименте ALICE на LHC [2], а ^{197}Au и ^{238}U – в эксперименте STAR на RHIC [3]. Было показано [4], что столкновения с разной начальной ориентацией деформированных ядер приводят к разным азимутальным распределениям множественности и поперечных импульсов рождающихся частиц. Рассматривалась возможность оценить адекватность параметризации формы деформированных ядер путем сравнения измеренных распределений с теорией [5]. Определённый интерес представляет спектаторная материя, которая формируется из невзаимодействующих нуклонов и представлена как свободными нуклонами, так и ядерными фрагментами. Было показано [6, 7], что измерение асимметрии вперед-назад спектаторных нейтронов помогает различать ориентированные центральные столкновения ^{238}U – ^{238}U .

В настоящей работе для вычисления состава спектаторной материи в ^{238}U – ^{238}U столкновениях на RHIC используется разработанная нами модель Abrasion–Ablation Monte Carlo for Colliders (AAMCC) [8, 9]. Моделирование каждого столкновения состоит из нескольких этапов. На первом этапе с помощью модели Glauber Monte Carlo [10] определяются размер и форма спектаторных префрагментов от обоих сталкивающихся ядер и вычисляются их энергии возбуждения. Далее к обоим префрагментам применяется алгоритм кластеризации с использованием минимального остовного дерева (MST) для определения вторичных кластеров. Наконец, распады вторичных кластеров моделируются посредством моделей испарения, Fermi break-up и статистической модели мультифрагментации (SMM) из библиотеки Geant4 [11]. Помимо спектаторных нейтронов, рассмотренных в работах [6, 7], в AAMCC моделируется также образование протонов-спектаторов и ядерных фрагментов.

В настоящей работе показано, что множественность нейтронов-спектаторов (N_{neutrons}) и их асимметрия вперед-назад (α_{neutrons}) существенно зависят от взаимной начальной ориентации ядер в центральных столкновениях ^{238}U – ^{238}U . Изучены центральные столкновения с минимальными значениями прицельного параметра ($b < 1$ фм) при энергии $\sqrt{s_{\text{NN}}} = 193$ ГэВ, которые в экспериментах характеризуются наибольшей множественностью регистрируемых вторичных частиц. Установлено, что наиболее широкое и наиболее узкое распределения α_{neutrons} наблюдаются в столкновениях типа tip-body (главные оси сталкивающихся ядер перпендикулярны друг другу, а одна из этих осей – параллельна пучку) и столкновениях типа side-side (обе главные оси ядер перпендикулярны пучку и друг другу) соответственно (рис. 1). Разброс отклонений от точной ориентации допускался в пределах 15° . Показано, что столкновения tip-body приводят к наибольшим (в перпендикулярном пучку ядре) и наименьшим (во втором ядре) значениям N_{neutrons} (рис. 2). События типа side-side также отличаются высокими значениями N_{neutrons} . Столкновения типов tip-tip и body-body, в которых ядра практически полностью накладываются друг на друга, а их главные оси располагаются, соответственно, параллельно и перпендикулярно пучку, обладают схожими профилями распределений α_{neutrons} и N_{neutrons} , однако существенно отличаются от остальных типов столкновений. Таким образом, центральные события типов tip-body и side-side могут быть выделены с помощью изучения состава спектаторной материи в столкновениях релятивистских деформированных ядер ^{238}U .

В центральных ^{238}U – ^{238}U столкновениях исследовано влияние величины параметра квадрупольной деформации β_2 на множественность спектаторных нейтронов и начальную эксцентricность области перекрытия ядер (файерболла), которая транслируется в эллиптические потоки рожденных частиц, измеряемые в экспериментах. Показано, что увеличение β_2 приводит к пропорциональному увеличению множественности нуклонов-спектаторов в tip-body столкновениях (рис. 3). Коэффициенты эксцентricности ϵ_2 и ϵ_4 , описывающие форму файерболла, также растут с увеличением β_2 : сильнее всего данный эффект заметен в столкновениях ^{238}U – ^{238}U типа body-body (рис. 4). Описанные эффекты позволяют исследовать ядерную деформацию, изучая столкновения деформированных релятивистских ядер.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-02-40035.

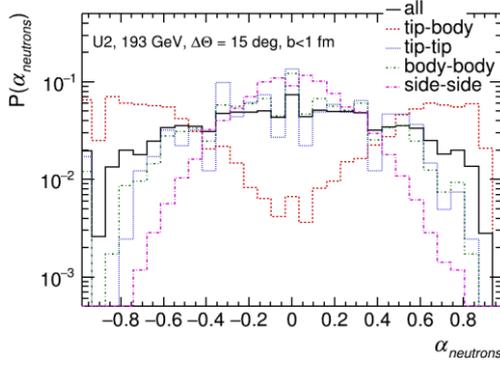


Рис. 1. Распределения асимметрии спектаторных нейтронов вперед-назад для центральных событий с различной взаимной ориентацией сталкивающихся ядер ^{238}U

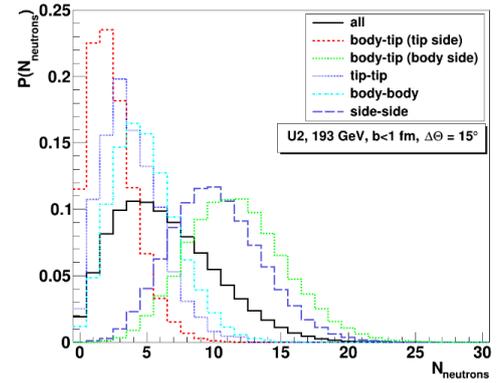


Рис. 2. Распределения множественности спектаторных нейтронов для центральных событий с различной взаимной ориентацией сталкивающихся ядер ^{238}U

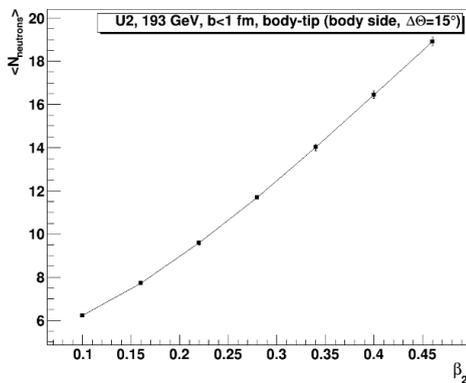


Рис. 3. Зависимость средней множественности спектаторных нейтронов от β_2 ядер ^{238}U в их центральных tip-body столкновениях

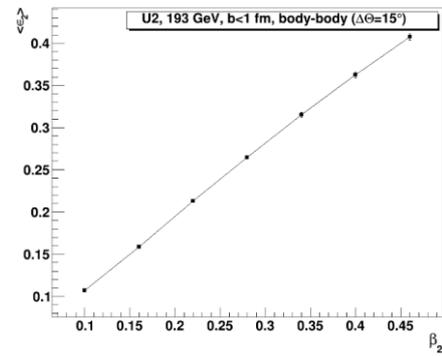


Рис. 4. Зависимость коэффициента эксцентricности ϵ_2 от β_2 ядер ^{238}U в их центральных body-body столкновениях

Литература

1. Shou Q.Y. [et al.]. Parameterization of deformed nuclei for Glauber modeling in relativistic heavy ion collisions // Phys. Lett. B. 2015. V. 749. P. 215.
2. Acharya S. [et al.]. Anisotropic flow in Xe–Xe collisions at $\sqrt{s_{\text{NN}}} = 5.44$ TeV // Phys. Lett. B. 2018. V. 784. P. 82.
3. Adameczyk L. [et al.]. Azimuthal Anisotropy in U + U and Au + Au Collisions at RHIC // Phys. Rev. Lett. 2015. V. 115. P. 222301.
4. Kundu S. [et al.]. Study of charged particle multiplicity, average transverse momentum and azimuthal anisotropy in Xe+Xe collisions at $\sqrt{s_{\text{NN}}} = 5.44$ TeV using AMPT model // Eur. Phys. J. A. 2019. V. 55. P. 157.
5. Giacalone G. Constraining the quadrupole deformation of atomic nuclei with relativistic nuclear collisions // Phys. Rev. C. 2020. V. 102, P. 024901.
6. Goldschmidt A. [et al.]. Collision geometry and flow in uranium + uranium collisions // Phys. Rev. C. 2015. V. 92. P. 044903.
7. Bairathi V. [et al.]. Selecting specific initial configurations using spectator neutrons in U + U collisions // Phys. Rev. C. 2015. V. 91. P. 054903.
8. Svetlichnyi A.O., Pshenichnov I.A. Formation of Free and Bound Spectator Nucleons in Hadronic Interactions between Relativistic Nuclei // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. P. 911.
9. Pshenichnov I.A., Dmitrieva U.A., Svetlichnyi A.O. Secondary Nuclei from Peripheral and Ultrapерipheral Collisions of Relativistic Heavy Ions // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. P. 1007.
10. Loizides C. [et al.]. Improved Monte Carlo Glauber predictions at present and future nuclear colliders // Phys. Rev. C. 2018. V. 97. P. 054910.
11. Allison J. [et al.]. GEANT4—a simulation toolkit // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A. 2016. V. 835. P. 186.

Увеличение времени спиновой когерентности в кольце-прототипе для измерения электрического дипольного момента протонов

А.А. Мельников¹, Ю.В. Сеничев¹, А.Е. Аксентьев^{1,2}

¹Институт ядерных исследований РАН

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Исследована спин-орбитальная динамика протонов в предполагаемой структуре накопительного кольца со слабой вертикальной фокусировкой для измерения электрического дипольного момента (ЭДМ) [1]. С помощью высокочастотного резонатора и двух семейств секступолей было получено максимальное время спиновой когерентности, составляющее 170 секунд. Была сформулирована гипотеза о дальнейшем увеличении времени спиновой когерентности путём уменьшения частот спиновой прецессии в трёх плоскостях фазовых колебаний частиц. Для этого необходимо установить третье семейство секступолей в точке с максимальной дисперсией и минимальными бета-функциями [2]. Для этой цели структура ускорителя была модернизирована. Новая структура накопительного кольца соответствует классической форме «рейстрек» с двумя арками.

Методика увеличения времени спиновой когерентности была подтверждена численными расчётами. С помощью трёх семейств секступолей было получено время спиновой когерентности порядка 1500 секунд, что является необходимым условием для проведения эксперимента по поиску ЭДМ.

Литература

1. *Lehrach A., Martin S., Talman R.* Design of a prototype EDM storage ring // PoS SPIN2018 (2019) 144. DOI: 10.22323/1.346.0144.
2. *Senichev Y., Maier R., Zyuzin D., Kulabukhova N.* Spin tune decoherence effects in electro- and magnetostatic structures // Proc. of IPAC2013, Shanghai, China.

Оценка чувствительности эксперимента NA62 (ЦЕРН) к поиску тяжёлых нейтрино в распадах заряженных пионов

К.Ю. Горшанов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт ядерных исследований РАН

Для оценки чувствительности эксперимента NA62 к поиску тяжёлых нейтрино в качестве источника заряженных пионов предлагается использовать $K2\pi$ распады:

$$K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^0, \pi^+ \rightarrow \mu^+ \nu. \quad (1)$$

Была разработана идея отбора данной цепочки распадов на установке эксперимента NA62 [1]. Идея применена к экспериментальным данным 2017 года и данным Монте-Карло. Для расчёта оценки чувствительности использовалось распределение квадрата потерянной массы:

$$M_{miss}^2 = (P_{\pi^+} - P_{\mu^+})^2, \quad (2)$$

здесь P_{π^+} и P_{μ^+} – это 4-импульсы пиона и мюона соответственно.

Также были изучены основные фоновые процессы. Детектор эксперимента NA62 и физические процессы в нём моделировались методом Монте-Карло с помощью специализированного пакета Geant4.

Полученная оценка чувствительности эксперимента (без учёта фоновых событий) к параметру смешивания мюонного нейтрино с тяжёлым нейтрино массой 30 МэВ равняется $|U_{\mu H}|^2 = 4.2 \cdot 10^{-7}$, что лучше текущего ограничения, установленного в эксперименте PIENU: $|U_{\mu H}|^2 = 10^{-5}$. [2]. Однако уровень фона снижает чувствительность эксперимента. После учёта фоновых событий оценка чувствительности эксперимента оказалась менее строгой, чем текущее ограничение, и равняется $|U_{\mu H}|^2 = 8.1 \cdot 10^{-4}$.

Литература

1. Cortina Gil E. [et al.]. The Beam and detector of the NA62 experiment at CERN // JINST 2017. V. 12. P05025.
2. Aguilar-Arevalo A. [et al.]. Search for heavy neutrinos in $\pi \rightarrow \mu\nu$ decay // Phys. Lett. B. 2019. V. 798. 134980.

УДК 530.145

Исследование поляризационных состояний, запутанных и декогерентных аннигиляционных фотонов

А.О. Стрижак^{1,2}, Д.С. Борисенко²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт ядерных исследований РАН

Первые эксперименты по доказательству запутанности аннигиляционных фотонов проводились в середине XX века. Основным ограничением подобных экспериментов является сложность поляризационных измерений высокоэнергетических фотонов (аннигиляционные фотоны – высокоэнергетические). Единственным способом измерения поляризации таких фотонов является использование Комптоновского рассеяния. Дифференциальное сечение Комптоновского рассеяния описывается знаменитой формулой Клейна–Нишины:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \frac{e^2}{m_e c^2} \frac{E_{\gamma_1}^2}{E_{\gamma}^2} \left(\frac{E_{\gamma_1}}{E_{\gamma}} + \frac{E_{\gamma}}{E_{\gamma_1}} - 2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi \right),$$

где ϕ – угол между плоскостью поляризации и плоскостью рассеяния, а θ – угол рассеяния. Жирным шрифтом подчеркнута угловая зависимость сечения. Согласно данной формуле, фотоны преимущественно рассеиваются перпендикулярно плоскости поляризации. Данный эффект используется в основе принципа работы комптоновского поляриметра. Комптоновский поляриметр состоит из одного рассеивателя (красный цилиндр на рис. 1а) и двух счетчиков (синие цилиндры на рис. 1а), расположенных под углом 90° друг к другу. Таким образом, можно измерить асимметрию рассеяния и соответственно поляризацию. Одним из важнейших параметров поляриметра является анализирующая способность $A = (N_p - N_{\perp}) / (N_p + N_{\perp})$. Для оптических поляриметров она практически равна 1. Для комптоновского поляриметра максимальное значение $A \sim 0.7$ для $E = 511 \text{ кэВ}$ (для угла $\theta = 82^\circ$). Из-за низкой анализирующей способности доказательство запутанности аннигиляционных фотонов традиционным использованием неравенства Белла невозможно. Используется метод азимутальной асимметрии комптоновского рассеяния фотонов (вычисляют отношение $R = N(\theta = 90^\circ) / N(\theta = 0^\circ)$). Согласно [1], если $R > 2$, то можно утверждать, что фотоны запутаны. Для декогерентных фотонов предполагается, что $R = 1$. Для перпендикулярно поляризованных незапутанных $R < 2$. Один из лучших результатов $R(\theta = 82^\circ) = 2.47 \pm 0.07$ [2]. Многие эксперименты получили отношение большее, чем $R = 2$. Соответственно, авторы были уверены, что доказали запутанность аннигиляционных фотонов. В 2019 году была опубликована теоретическая статья [3], результаты которой противоречат выводам Ю. Ааронова и Бома. Согласно [3], сечение комптоновского рассеяния декогерентных фотонов совпадает с сечением запутанных. Чтобы проверить данное противоречие, в ИЯИ РАН была сконструирована экспериментальная установка (рис. 1б, в) для изучения комптоновского рассеяния декогерентных и запутанных аннигиляционных фотонов. Установка состоит из двух плеч, между которыми расположен источник аннигиляционных фотонов (Na-22). Каждое плечо состоит из рассеивателя и 16 сцинтилляционных детекторов, расположенных под углами $22,5^\circ$ относительно друг друга.

Для создания пар декогерентных фотонов используется промежуточный рассеиватель (сцинтиллятор GAGG, показан жёлтым цилиндром возле рассеивателя правого плеча на рис. 1б). Если поместить источник аннигиляционных фотонов ближе к плечу с GAGG, то запутанность должна нарушаться при взаимодействии фотона с промежуточным рассеивателем.

Для запутанных (рис. 2а) и декогерентных (рис. 2б) фотонов была построена зависимость количества одновременных срабатываний счётчиков с разных плеч, расположенных под углом ϕ друг относительно друга $N(\phi)$. Согласно теоретическим предсказаниям [4], эта зависимость должна иметь

следующий вид: $N(\phi) = A + B \cos(2\phi)$. Так как в каждом плече по 16 сцинтилляционных детекторов NaI, то для каждого угла существует 16 пар детекторов, которые вносят вклад в суммарное количество срабатываний, что значительно увеличивает статистику по сравнению с предыдущими экспериментами, в которых использовалось меньше детекторов рассеянных фотонов. Аппроксимировав экспериментальные результаты указанной функцией, мы получили результаты для отношения R , указанные на графиках. Согласно теоретическим подсчётам $R(\theta = 90^\circ) = 2.6$. Учитывая конечные геометрические размеры системы, полученное экспериментальное отношение совпадает с теоретическим. Учтём, что после рассеяния в дополнительном рассеивателе R , полученная для декогерентных фотонов (в силу ненулевого угла рассеяния в GAGG) меньше истинного. При одинаковой геометрии рассеяния R для декогерентных и запутанных пар совпадают, что подтверждает выводы, сделанные в [3].

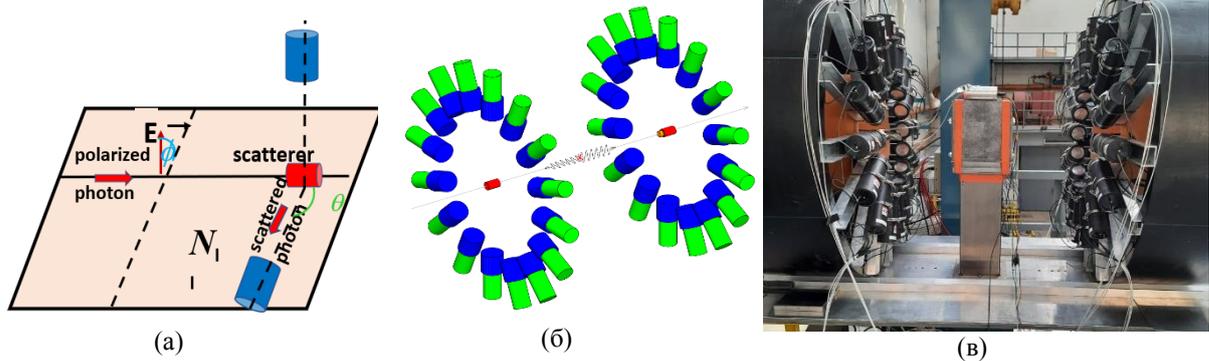


Рис. 1. Схема комptonовского поляриметра. (а) Принципиальная схема, (б) и фотография (в) экспериментальной установки

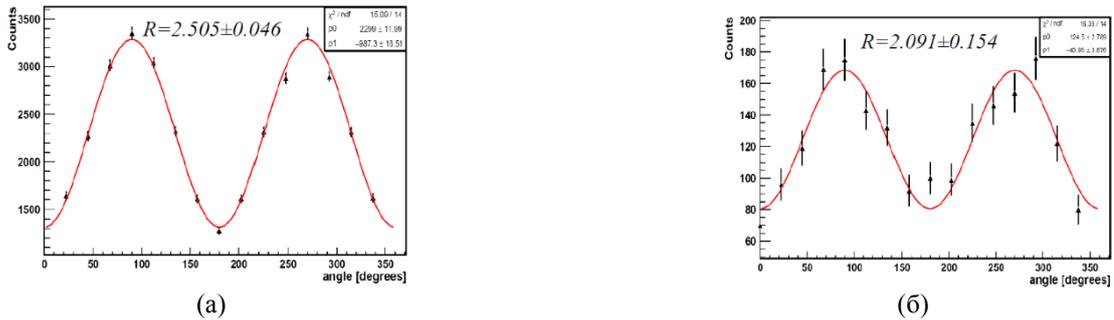


Рис. 2. Асимметрия рассеяния запутанных (а) и декогерентных (б) пар фотонов

На рис. 3 показана экспериментально полученная корреляционная функция S для запутанных фотонов. Для четырех поляриметров с оптическими осями (a, a', b, b') [5] можно построить корреляционные коэффициенты $E(a, b)$:

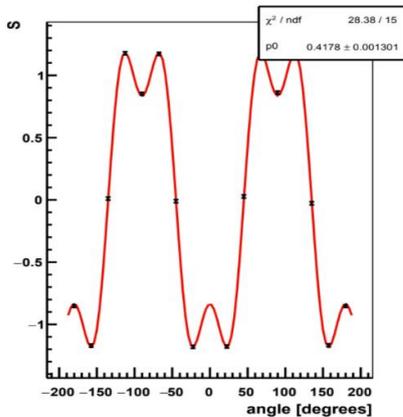


Рис. 3. Зависимость S от угла между оптическими осями поляриметров для запутанных пар фотонов

$$E(\vec{a}, \vec{b}) = \frac{N(a_p, b_p) + N(a_\perp, b_\perp) - N(a_p, b_\perp) - N(a_\perp, b_p)}{N(a_p, b_p) + N(a_\perp, b_\perp) + N(a_p, b_\perp) + N(a_\perp, b_p)},$$

где $N(x, y)$ – количество совпадений на счётчиках x и y разных плеч. a_p, a_\perp означают параллельность или перпендикулярность счетчика к оптической оси поляриметра a , состоящего из этих счетчиков.

Корреляционная функция S вычисляется как следующая комбинация корреляционных коэффициентов:

$$S = E(\vec{a}, \vec{b}) - E(\vec{a}, \vec{b}') + E(\vec{a}', \vec{b}) + E(\vec{a}', \vec{b}').$$

Для запутанных фотонов теоретически предсказанное максимальное значение $S_{max} = 2\sqrt{2}$. Для комptonовских поляриметров $S \rightarrow S' = SA^2 < S/2 < 2$, что и подтверждает полученный результат.

Литература

1. *Bohm D. and Aharonov Y.* // Phys. Re. V. 108, 1070.
2. *Lanngoff H.* // Zeitschrift fur Physik, V. 160, P. 186–193, Apr 1960.
3. *Hiesmayr B., Moskal. P.* // 2019. Sci Rep 9, 8166.
4. *Kasday L. R., Ullman J.D, Wu C. S.* // Il Nuovo Cimento B. V. 25, P. 633–661 (1975).
5. *Aspect A.* Bell's Theorem: The Naive View of an Experimentalist // 2002. arXiv:quant-ph/0402001.

УДК 539.172.3

Моделирование трансмутации ядер свинца в ультрапериферических столкновениях на ЛНС

У.А. Дмитриева^{1,2}, И.А. Пшеничнов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт ядерных исследований РАН

В адронных взаимодействиях ультрарелятивистских ядер вторичные частицы рождаются в области перекрытия ядер, а оказавшиеся вне её остатков ядер-партнёров по столкновению движутся строго вперёд и образуют спектаторные фрагменты. Полные сечения адронных ядро-ядерных взаимодействий относительно слабо зависят от энергии и в случае $^{208}\text{Pb}-^{208}\text{Pb}$ столкновений составляют около 7 барн [1]. В ультрапериферических столкновениях (УПС) без перекрытия ядерных плотностей ядра воздействуют друг на друга исключительно лоренц-сжатыми кулоновскими полями ядер-партнёров по столкновению, что приводит к их электромагнитной диссоциации (ЭМД) с полным сечением, достигающим 200 барн в столкновениях $^{208}\text{Pb}-^{208}\text{Pb}$ на ЛНС [1, 2]. В противоположность адронной фрагментации сечения образования вторичных ядер в ЭМД существенно зависят от энергии столкновений, так как максимальная энергия электромагнитных возбуждений ядер растёт пропорционально лоренц-фактору [2, 3]. Поэтому помимо эмиссии нейтронов, доминирующей в ЭМД при низких энергиях [3], на ЛНС можно ожидать каналы распада с вылетом протонов, рассматриваемые в настоящей работе. Эксперимент ALICE на ЛНС имеет уникальную возможность регистрировать вылетающие вперёд протоны и нейтроны с помощью передних адронных калориметров (ZDC). В настоящей работе исследуется возможность оценки сечений образования вторичных ядер в ЭМД ядер свинца ^{208}Pb посредством измерения сечений вылета определённого количества нейтронов и протонов. Моделирование ЭМД ядер ^{208}Pb на ЛНС при энергии $\sqrt{s_{\text{NN}}}=5.02$ ТэВ выполнено с помощью модели RELDIS [2], которая позволяет вычислить как сечения образования различных вторичных ядер в результате ЭМД, так и сечения эмиссии определённого числа нуклонов, представленные на рис. 1 и 2.

На рис. 1 сопоставлены сечения эмиссии определённого числа протонов (от 0 до 10) и соответствующие сечения образования различных вторичных ядер от свинца Pb до тантала Ta и гафния Hf. Как видно из рисунка, сечения выходов Pb, Tl, Hg и Au неплохо аппроксимируются соответствующими сечениями выходов 0, 1, 2 и 3 протонов. Такое согласие объясняется довольно низкой средней энергией возбуждения, обычно менее 1 МэВ [3], приходящейся на нуклон остаточного ядра после внутриядерного каскада, вызванного эквивалентными фотонами. В результате эмиссии нуклонов в процессе внутриядерного каскада образуется возбужденное одиночное тяжелое ядро-остаток, которое испаряет нуклоны и, возможно, подвергается ядерному делению [3], но не мультифрагментации, которая возможна только при энергиях возбуждения выше 3 МэВ/нуклон. При этом вероятность деления оценивается RELDIS величиной, не превышающей 1%. В других редких случаях (на уровне нескольких процентов) остаточное ядро не может быть однозначно определено путем регистрации испущенных ^{208}Pb нуклонов по причине фоторождения заряженных пионов на внутриядерных нуклонах с превращением нейтронов в протоны и наоборот или эмиссии нерегистрируемых дейтронов или альфа-частиц, помимо испарения нуклонов. Таким образом, благодаря ограниченной энергии возбуждения ядер после поглощения фотонов наиболее вероятными каналами ЭМД оказываются каналы с эмиссией небольшого числа нуклонов, а массовое число и заряд остаточного ядра однозначно определяется количеством испущенных нейтронов и протонов. В частности, измеряя сечения вылета определённого числа протонов, можно оценить сечения образования определённых элементов, см. рис. 1.

Также измеряя сечения эмиссии определённого числа нейтронов в событиях без эмиссии протонов, можно оценить сечения образования определённых изотопов свинца, см. рис. 2. Согласно

RELDIS, сечения эмиссии одного, двух и трех нейтронов без протонов очень близки к сечениям образования $^{207,206,205}\text{Pb}$ соответственно. Сечения беспротонной эмиссии четырех, пяти, шести и семи нейтронов можно рассматривать как верхние пределы для сечений образования $^{204,203,202,201}\text{Pb}$ соответственно. Разница между данными сечениями связана с эмиссией дополнительных частиц, например протонов и/или заряженных π -мезонов, что приводит к образованию остаточных ядер, отличных от Pb.

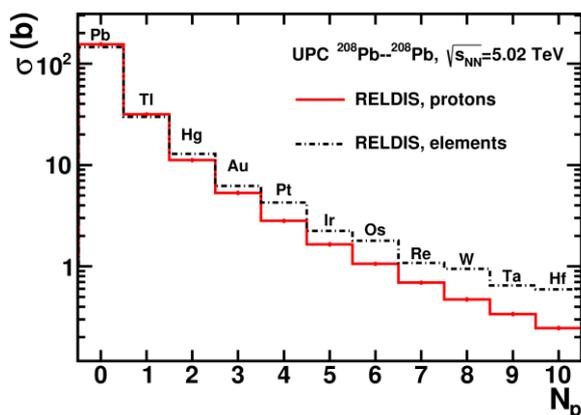


Рис. 1. Сечения эмиссии заданного числа протонов (сплошная гистограмма) и сечения образования соответствующих вторичных ядер (пунктир), предсказываемые моделью RELDIS [2] для столкновений ^{208}Pb на LHC при $\sqrt{s_{NN}}=5.02$ ТэВ

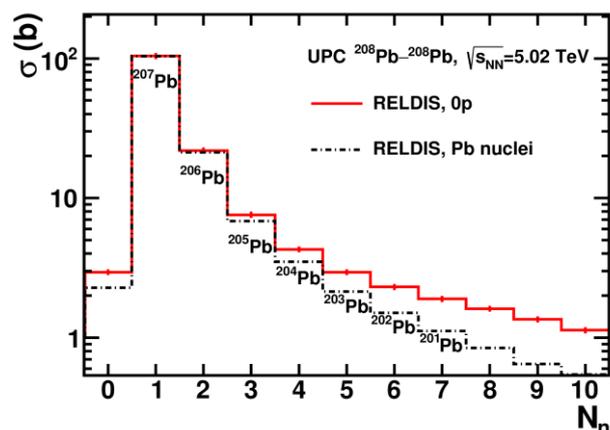


Рис. 2. Сечения эмиссии заданного числа нейтронов в отсутствие протонов (сплошная гистограмма) и сечения образования изотопов свинца (пунктир), предсказываемые моделью RELDIS [2] для столкновений ^{208}Pb на LHC при $\sqrt{s_{NN}} = 5.02$ ТэВ

На основе выполненных вычислений с помощью модели RELDIS можно сделать вывод о возможности оценки сечений образования вторичных ядер, которые не могут быть напрямую измерены, путем измерения выходов соответствующего числа протонов и нейтронов в эксперименте ALICE на LHC. Ранее коллаборацией ALICE были измерены сечения ЭМД с испусканием одного, двух и трех нейтронов в УПС ядер свинца ^{208}Pb с энергией $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$ ТэВ [1] и было показано, что каналы с эмиссией одного и двух нейтронов доминируют в событиях ЭМД. Наши вычисления показывают, что с уверенностью можно говорить о доминировании образования ^{207}Pb и ^{206}Pb . Отношение заряда к массе у этих вторичных ядер близко к таковому для ^{208}Pb , поэтому их траектории в магнитном поле LHC также будут близки. Такие вторичные ядра могут некоторое время циркулировать в коллайдере вместе с ядрами пучка, а при сходе с траектории вдали от точки их образования попадать в конструкционные элементы LHC, включая сверхпроводящие магниты, и приводить к их локальному нагреву и потере сверхпроводимости [5].

В заключение следует отметить, что выполненное в настоящей работе моделирование показывает возможность трансмутации ядер свинца в результате ЭМД в другие элементы, включая золото. Расчеты показывают возможность оценки сечений образования различных вторичных ядер путем измерения сечений эмиссии соответствующего количества нейтронов и протонов. Такие сечения могут быть использованы для моделирования воздействия вторичных ядер на компоненты LHC, в частности, на сверхпроводящие магниты, а также могут быть полезны при проектировании будущего коллайдера FCC-hh.

Литература

1. *Abelev B. et al.* Measurement of the Cross Section for Electromagnetic Dissociation with Neutron Emission in Pb-Pb Collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$ TeV // *Phys. ReV. Lett.* 2012. V. 109. P. 252302.
2. *Пшеничнов И.А.* Электромагнитные возбуждения и фрагментация ультрарелятивистских ядер // *ЭЧАЯ.* 2011. Т. 42. С. 415–475.
3. *Bertulani C. A., Baur G.* Electromagnetic processes in relativistic heavy ion collisions // *Phys. ReP.* 1988. V. 163. P. 299.
4. *Pshenichnov I.A. et al.* Intranuclear-Cascade model calculation of photofission probabilities for actinide nuclei // *Eur. Phys. J. A.* 2005. V. 24, P. 69–84.

5. Bruce R., Gilardoni S., Jowett J. M. and Bocian D. Beam losses from ultraperipheral nuclear collisions between $^{208}\text{Pb}^{82+}$ ions in the Large Hadron Collider and their alleviation // Phys. ReV. Spec. Top. Accel. Beams. 2011. V. 12. P. 1–17.

УДК 539.126.33

Анализ ассоциативного рождения заряженного V -мезона и состояний чармония и боттомия в эксперименте CMS

А.Г. Сахарова

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Эксперименты Большого Адронного Коллайдера ставят своей задачей как подтверждение или нарушение теоретических предсказаний Стандартной модели, так и обнаружение неизвестных состояний. Детальный анализ адронов, содержащих b , c -кварки, позволяет приблизить понимание природы сильного взаимодействия в рамках квантовой хромодинамики, а также реализует поиск Новой Физики.

В протон-протонных столкновениях БАК рождается большое количество частиц. В частности, пара тяжелых (масса 172.5 ГэВ [1]) $t\bar{t}$ -кварков, которые ввиду малого времени жизни (по оценкам, порядка 5×10^{-25} с [2]), распадаются слабым образом на b -кварк и W -бозон. Такой процесс является источником события $V^+ \mu^+ \mu^-$, где два мюона вылетают из первичной вершины PV. V^+ -мезон хорошо восстанавливается в канале распада $V^+ \rightarrow J/\psi K^+ \rightarrow \mu^+ \mu^- K^+$. Источниками мюонов из PV могут послужить резонансные состояния: J/ψ , $\Upsilon(1S)$, Z , имеющие наибольший интерес для проверки теоретических моделей двойного партонного рассеяния (Double Parton Scattering [3]). Также большой вклад фоновых событий вносят Дрелл-Янг [4] процесс и нерезонансные мюоны из распада W -бозона. Изучение последних также полезно для проверки лептонной универсальности путем сравнения вероятности распада (Branching Ratios) W -бозона на один из трех типов лептонов (e, μ, τ) и соответствующее нейтрино.

Для изучения вышеуказанных событий в данной работе использовались данные детектора CMS [5] Run II в ходе работы в 2017 году в протон-протонных столкновениях с энергией пучка 13 ТэВ в системе центра масс.

Восстановление кандидатов в V^+ -мезоны начинается с поиска двух мюонов противоположных зарядов, треки которых фитируются в общую вершину для получения $J/\psi \rightarrow \mu^+ \mu^-$. Отобранные кандидаты фитируются в общую вершину с заряженным K^+ -мезоном, что дает вершину распада V^+ -мезона. После этого, рассматриваются треки вылетевшего из первичной вершины V^+ совместно с двумя мюонами разных знаков. В процессе восстановления распада и в ходе анализа данных, для получения сигнальных событий используются следующие критерии отбора к частицам и их трекам: Мюоны из J/ψ : поперечный импульс мюона: $p_T(\mu^\pm) > 2.1$ ГэВ, массовое окно димюонного кандидата: $2.94 \text{ ГэВ} < m(\mu^+ \mu^-) < 3.25$ ГэВ, поперечный импульс J/ψ : $p_T(J/\psi) > 6$ ГэВ, вероятность фита димюонной вершины: $J/\psi_{\text{vtxprob}} > 0.01$.

$$\text{K}^+ \text{ мезон: } |\eta| < 2.4, p_T(K^+) > 2 \text{ ГэВ.}$$

V^+ мезон: массовое окно: $5.1 \text{ ГэВ} < m(V^+) < 5.6$ ГэВ, $p_T(V^+) > 6$ ГэВ, $|\eta| < 2.4$, $V_{\text{vtxprob}} > 0.01$, отлет от первичной вершины (PV) $V_{\text{dist}} > 0.1$ см. Косинусы угла между направлением на PV и импульсом $p_T(V^+)$, а также между направлением на вершину распада V^+ и импульсом J/ψ $p_T(\mu^+ \mu^-)$ больше, чем 0.99 (в поперечной плоскости).

Мюоны из первичной вершины: $p_T(\mu^\pm) > 1.5$ ГэВ, $\max[p_T(\mu^+), p_T(\mu^-)] > 2.8$ ГэВ, $p_T(\mu^+ \mu^-) > 3$ ГэВ, $J/\psi_{\text{vtxprob}} > 0.01$. Косинусы углов между направлением на PV и импульсом $p_T(\mu^+ \mu^-)$ больше, чем 0.99 (в поперечной плоскости).

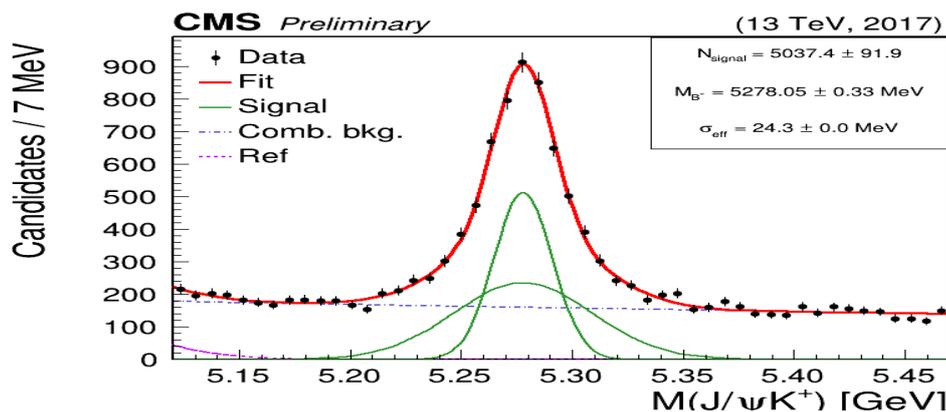


Рис. 1. Распределение по инвариантной массе отобранных $B^+ \rightarrow J\psi K^+$ кандидатов.

Чёрные точки показывают данные, красная сплошная линия – полную аппроксимирующую функцию, зелёная – сигнал, синяя пунктирная – фон, а фиолетовая штрихпунктирная – отражение – потерянная масса B^+ -мезона из распада $B^+ \rightarrow J\psi K^+ \pi^0$

На рис. 1 представлено распределение по инвариантной массе отобранных кандидатов. Виден значительный пик в районе PDG-массы $J\psi K^+$ [1] – 5279.34 ± 0.12 МэВ. Это распределение с использованием ПО RooFit [6] аппроксимируется суммой сигнальной и фоновой компонент, где сигнал описывается двумя функциями Гаусса, а фон – экспоненциальной функцией, со свободными при фитировании параметрами. Результаты также представлены на рис. 1.

Аппроксимация дает 5037.4 ± 91.9 сигнальных событий, а полученная из фита масса B^+ -мезона, 5278.05 ± 0.33 МэВ, находится в хорошем согласии с данными PDG.

Полученный качественный сигнал дает возможность продолжать работу над изучением ассоциативного рождения B^+ -мезона и двух мюонов разного знака. Ближайшими планами автора настоящей работы представляется подробный анализ распределения массы димюона из первичной вершины в различных диапазонах и дальнейшее изучение данных для проверки теоретических моделей.

Литература

1. Zyla P. A. *et al.* (Particle Data Group), Prog. Theor. Exp. Phys. 2020, 083C01 (2020) and 2021 update.
2. Quadt A. Top quark physics at hadron colliders // Eur. Phys. J. C 48, 835–1000 (2006).
3. Manohar A.V., Waalewijn W.J. What is double scattering? // Phys. Lett. B 713 (2012) 196–201.
4. The CMS Collaboration., Sirunyan A.M., *et al.* Measurement of the differential Drell-Yan cross section in proton-proton collisions at $\sqrt{13}$ TeV // J. High Energ. Phys. 2019, 59 (2019).
5. The CMS Collaboration, Chatrchyan S. *et al.* The CMS experiment at the CERN LHC // JINST. 2008. V. 3. P. S08004.
6. Verkerke W., Kirkby D.P. The RooFit toolkit for data modeling // eConf C. 2003. V. 0303241. P. MOLT007.

УДК 53.01

Вклад релятивистской обратной связи в динамику лавин релятивистских убегающих электронов в сложных грозовых электрических структурах

Стадничук Е.М.^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

В атмосфере Земли наблюдается загадочное природное явление – Terrestrial Gamma-ray Flashes (TGF) [1]. Возможная причина наземных гамма-вспышек – тормозное излучение ускоряемых крупномасштабными грозовыми электрическими полями релятивистских электронов [2]. Взаимодействие ускоряемых электронов с молекулами воздуха приводит к рождению дополнительных релятивистских электронов, что приводит к образованию так называемых лавин релятивистских убегающих электронов (ЛРУЭ) [3]. Большое количество высокоэнергичных частиц внутри грозовых облаков может получиться в следствие механизмов обратной связи в динамике ЛРУЭ [4]. Обратная связь в физике лавин

приводит к их размножению, а при определённых условиях она может привести к электромагнитному взрыву – экспоненциальному росту количества высокоэнергичных частиц внутри грозового облака. Такой взрыв приводит к разрядке грозового электрического поля, а также гипотетически является источником TGF.

На сегодняшний день известно два вида обратной связи. Релятивистская обратная связь появляется в динамике ЛРУЭ вследствие рождения позитронов тормозным гамма-излучением, а также вследствие разворота гаммы за счёт комптоновского рассеяния на молекулах воздуха. Эти процессы приводят к рождению вторичных лавин убегающих электронов в области позади первичных лавин, что приводит к самоподдерживающемуся размножению релятивистских частиц [4]. Второй вид обратной связи появляется в сложных грозовых электрических структурах: лавины усиливаются за счёт обмена тормозным гамма-излучением между различными областями с сильным электрическим полем внутри грозового облака (рис. 1). Этот обмен приводит к цепной реакции, размножающей лавины релятивистских электронов во всём объёме грозового облака [5]. Этот механизм обратной связи, появляющейся вследствие неоднородной геометрии электрического поля, называется реакторной обратной связью.

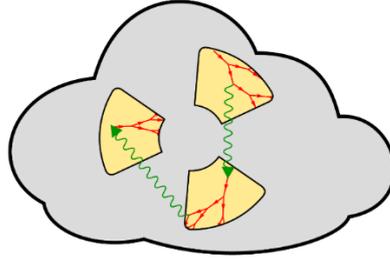


Рис. 1. Иллюстрация механизма реакторной обратной связи [5]

В настоящей работе проводится сравнение вклада релятивистской и геометрической реакторной обратной связи в динамику электронов. Их совместное влияние на физику ЛРУЭ можно описать с помощью матрицы переизлучения. Матрица переизлучения показывает, как меняется интенсивность гамма-излучения областей сильного электрического поля внутри сложного грозового облака от поколения обратной связи к поколению:

$$\vec{G}^{i+1} = \Gamma \vec{G}^i \quad (1)$$

Здесь i – номер поколения, Γ – матрица переизлучения, G_j^i – количество гаммы, которое излучила j -я область электрического поля в i -м поколении. Диагональные элементы матрицы переизлучения описывают вклад релятивистской обратной связи, недиагональные элементы описывают взаимодействие грозовых областей посредством реакторной обратной связи. В простейшей реакторной модели, состоящей из двух ускоряющих в сторону друг друга электроны областей с сильным полем, матрица переизлучения имеет простой вид:

$$\Gamma_{\text{simple reactor}} = \begin{pmatrix} \Gamma_{11} & \Gamma_{12} \\ \Gamma_{21} & \Gamma_{22} \end{pmatrix} \quad (2)$$

Матричные элементы вычисляются согласно формулам:

$$\Gamma_{kk} = \frac{P_+^k P_-^k \lambda_{RREA}^k \lambda_-^k}{(\lambda_-^k + \lambda_{RREA}^k) \lambda_2^k \lambda_\gamma^k \lambda_+^k} \left(\frac{\lambda_{RREA}^k \lambda_x^k}{\lambda_x^k - \lambda_{RREA}^k} \right)^2 \cdot \left(e^{\frac{L^k (\lambda_x^k - \lambda_{RREA}^k)}{\lambda_x^k \lambda_{RREA}^k}} - 1 - \frac{L^k (\lambda_x^k - \lambda_{RREA}^k)}{\lambda_x^k \lambda_{RREA}^k} \right) \quad (3)$$

$$\Gamma_{mk} = \frac{P_-^m \lambda_{RREA}^m \lambda_-^m}{\lambda_e^- \lambda_\gamma^m (\lambda_{RREA}^m + \lambda_-^m)} \left[\frac{\lambda_{RREA}^m \lambda_-^k}{\lambda_-^k - \lambda_{RREA}^m} \left(e^{L^m \frac{\lambda_-^k - \lambda_{RREA}^m}{\lambda_{RREA}^m \lambda_-^k}} - 1 \right) - \lambda_-^k \left(1 - e^{-\frac{L^m}{\lambda_-^k}} \right) \right], m \neq k \quad (4)$$

Здесь для релятивистской обратной связи учтена лишь позитронная обратная связь, P_+ и P_- – вероятности разворота позитрона и электрона соответственно, λ_{RREA} – длина нарастания ЛРУЭ, λ_- – длина затухания гамма-излучения, λ_e^- – длина пробега гаммы до рождения убегающего электрона, λ_x – длина аннигиляции позитрона, λ_γ – длина пробега убегающего электрона до тормозного гамма-излучения, λ_2 – длина пробега позитрона до рождения убегающего электрона, λ_+ – длина пробега гаммы до рождения электрон-позитронной пары, L – длина области сильного поля. Условия бесконечной обратной

связи достигаются, когда одно из собственных значений матрицы переизлучения больше 1, что при одинаковых грозовых областях приводит к критерию возникновения электромагнитного взрыва:

$$\Gamma_{11} + \Gamma_{21} \geq 1 \quad (5)$$

Из формулы (5) следует, что относительный вклад механизмов обратной связи можно изучить из соотношения между матричными элементами. Оказывается, что в условиях бесконечной обратной связи подавляющий вклад в динамику ЛРУЭ вносит реакторная обратная связь, в то время как релятивистская обратная связь пренебрежимо мала (рис. 2). Это является следствием малости сечения образования электрон-позитронных пар гамма-излучением релятивистских лавин убегающих электронов.

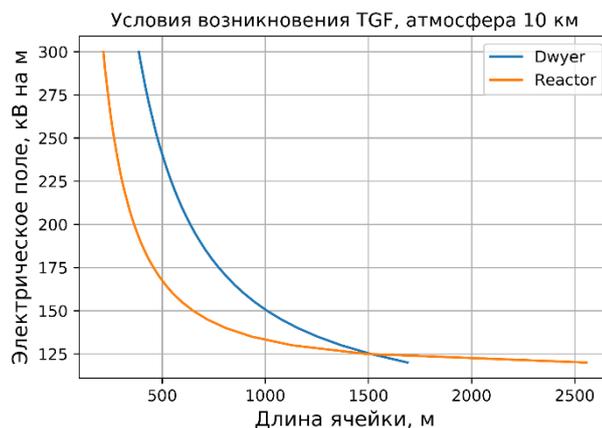


Рис. 2. Сравнение вкладов позитронной обратной связи Двайера и реакторной обратной связи

Литература

1. Ostgaard N., Neubert T., Reglero V., Ullaland K., Yang S., Genov G.,... Alnussirat S. First 10 months of tgf observations by asim // Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 124 (24), 14024–14036, 2019.
2. Babich L.P. Relativistic runaway electron avalanche // Physics-Uspekhi, 63 (12), 1188–1218, 2020.
3. Gurevich A., Milikh G., & Roussel-Dupre R. Runaway electron mechanism of air breakdown and preconditioning during a thunderstorm // Physics Letters A, 165(5), 463–468, 1992.
4. Dwyer J.R. Relativistic breakdown in planetary atmospheres // Physics of Plasmas, 14 (4), 042901, 2007.
5. Stadnichuk E., Svechnikova E., Nozik A., Zemlianskaya D., Khamitov T., Zelenyy M., & Dolgonosov M. Relativistic runaway electron avalanches within complex thunderstorm electric field structures // arXiv:2105.02818, 2021.

УДК 53.01

Матрица переизлучения в реакторной модели лавин убегающих электронов

Э.С. Ким¹, Д.И. Землянская¹, Е.М. Стадничук^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики

Последние результаты в физике атмосферы высоких энергий связывают лавины релятивистских убегающих электронов, ускоряемых электрическим полем в грозовых облаках, с грозовыми явлениями, например, таким уникальным природным явлением, как наземные гамма-вспышки (TGF, Terrestrial Gamma-ray Flashes) [1–2].

Исследования показывают, что для образования TGF недостаточно одного лишь существования лавины убегающих электронов. Необходимо выполнение следующих условий: 1) механизм образования новых лавин релятивистских электронов в облаке; 2) критерии применимости такого механизма должны быть сопоставимы с параметрами реальных грозовых облаков. Возможный механизм дополнительной генерации предложил Джозеф Двайер, т.н. механизм обратной связи [3]. Однако бесконечная обратная связь Двайера наблюдается лишь при наличии слишком больших крупномасштабных атмосферных электрических полей [4].

Вышеописанное послужило причиной для создания новой модели динамики лавин убегающих электронов с обратной связью, названной реакторной моделью [5]. Суть такой модели в том, что за счет неоднородности в грозовых электрических полях усиление лавин релятивистских частиц становится более интенсивным. Общий рост потока высокоэнергетических частиц обусловлен тем, что в

неоднородном поле ячейки с квазиоднородным электрическим полем обмениваются гамма-излучением.

Рассмотрим реактор, состоящий из n ячеек некоторой формы. Такой подход не сфокусирован на конкретной геометрии ячеек, и позволяет сформулировать уравнение динамики реактора без потери общности.

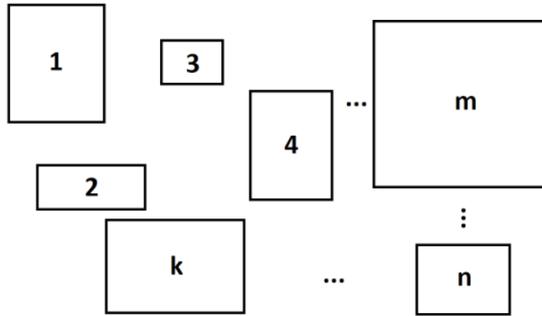


Рис. 1. Эскиз n -ячеечного реактора

Пусть $A^i = (a_1^i, \dots, a_n^i)^T$ – вектор распределения точек рождения лавин убегающих электронов в ячейках в i -ом поколении обратной связи, \hat{F}_{mk} – оператор обратной связи из k -й ячейки в m -ю. Тогда распределение лавин убегающих электронов в следующем поколении определяется следующим образом $A^{i+1} = \hat{F} A^i$.

Рассмотрение динамики реактора значительно упростится, если перейти к изучению количества излученной гаммы вместо распределения точек рождения лавин убегающих электронов в k -й ячейке. Реализация такого подхода требует, чтобы распределения излучаемой ячейками гаммы сохранялись от поколения обратной связи к поколению. Меняться должно только количество гаммы.

Пусть $G^i = (g_1^i, \dots, g_n^i)^T$ – вектор количества гаммы, вылетающих из ячеек в i -м поколении обратной связи, а Γ_{mk} – количество гаммы, родившейся в следующем поколении в ячейке m под действием ячейки k . В таком случае вектор количества гаммы в $i+1$ -м поколении находится по формуле $G^{i+1} = \Gamma G^i$.

Такое описание позволяет свести задачу о динамике реактора к простому нахождению собственных значений числовой матрицы.

Данная работа посвящена вычислению матричных элементов матрицы переизлучения в реакторной модели с цилиндрическими ячейками в первом приближении. Так как тормозное излучение электронов в основном сосредоточено по направлению движения частицы, считаем, что k -я излучающая ячейка излучает гамму только своим нижним основанием.

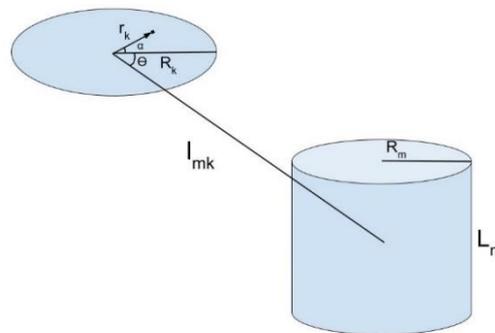


Рис. 2. Схематическое изображение двух взаимодействующих ячеек.

Ячейки проиндексированы индексом k – для излучающей ячейки, m – для переизлучающей. Точное решение задачи является слишком громоздким, а также трудно вычислимым, в связи с чем в работе предложен метод приближенного вычисления матричных элементов. Пусть $S_m \cong (R_m^2 L_m)^{\frac{1}{3}}$

– характерный размер переизлучающей ячейки. Тогда в самом общем случае произвольно расположенных ячеек элементы матрицы переизлучения приближенно вычисляются следующим образом:

$$\Gamma_{mk} = \int_0^{R_k} dr_k \int_0^{2\pi} r_k d\alpha \frac{PS_m^2 \lambda_{RREA} \lambda_-^2 e^{-\frac{(i_{mk} - S_m)}{\lambda_- \sin \phi}}}{4\pi^2 R_k^2 (i_{mk}')^2 \lambda_- \lambda_\gamma (\lambda_- + \lambda_{RREA})} \left[\frac{\lambda_{RREA} e^{\frac{2S_m}{\lambda_{RREA}}} \sinh\left(\frac{S_m (\lambda_- \sin \phi + \lambda_{RREA})}{\lambda_- \lambda_{RREA}}\right)}{(\lambda_- \sin \phi + \lambda_{RREA})} e^{-\frac{(\lambda_- \sin \phi + \lambda_{RREA}) i_{mk}'}{\lambda_- \lambda_{RREA}}} - \sinh\left(\frac{S_m}{\lambda_-}\right) e^{-\frac{i_{mk}'}{\lambda_-}} \right]$$

Обозначения в данной работе соответствуют таковым же в работе [6]. Данная формула применима в случае, если $i_{mk}' \geq S_m$ и сходится к точному решению на асимптотике $i_{mk}' \rightarrow \infty$.

Литература

1. Gurevich A.V. Zybin K.P. // Physics-Uspekhi. 4420011119.
2. Dwyer J.R. // Journal of Geophysical Research: Atmospheres. 1132008.
3. Dwyer J.R. // Geophysical Research Letters. 302003.
4. Zelenyi Mikhail, Stadnichuk Egor, Nozik Alexander // EPJ Web Conf. 201201907003.
5. Zelenyi M., Nozik A. Stadnichuk E. // AIP Conference Proceedings. 21632019060005.
6. Стадничук Е., Простейшая реакторная модель динамики лавин убегающих электронов в грозовых облаках // Труды 63-й Всероссийской научной конференции МФТИ 23–29 ноября 2020 года. Фундаментальная и прикладная физика. Москва : МФТИ, 2020. С. 253–254.

УДК 539.1.05

Изучение регистрации частиц легкой тёмной материи в ближнем детекторе нейтринного эксперимента T2K

А.С. Шварцман^{1,2}

¹ Институт ядерных исследований РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Существование скрытого сектора элементарных частиц, взаимодействующего с частицами Стандартной Модели, мотивируется многими экспериментальными наблюдениями и теориями, расширяющими Стандартную Модель. Из космологии известно, что до 27% массы Вселенной составляет темная материя, которая очень слабо взаимодействует с обычной материей [1]. Различные теории предсказывают, что могут существовать частицы, взаимодействующие и с тёмной материей, и с обычной – например, тёмные фотоны [2]. Обнаружить их можно по распадам и по рассеянию на нуклонах и электронах. В эксперименте T2K, направленном на поиск нейтринных осцилляций, также есть возможность для поиска тёмных фотонов. Они могут рождаться при столкновении высокоэнергетического пучка протонов с мишенью (рис. 1), либо в процессах распадов нейтральных мезонов, и могут быть зарегистрированы в ближнем детекторе ND280. Основной задачей для обнаружения тёмных фотонов в ND280 является подавление фона от нейтринных взаимодействий.

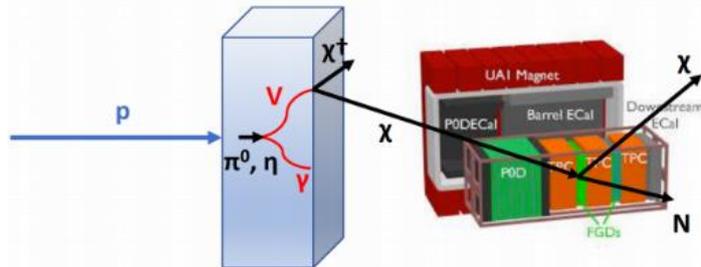


Рис. 1. Получение тёмных фотонов

В данной работе рассмотрены процессы рассеяния темного фотона на электроне. Пример события приведен на рис. 2. Приведены результаты исследования фона от мюонов, электронов и других частиц в треке ND280.

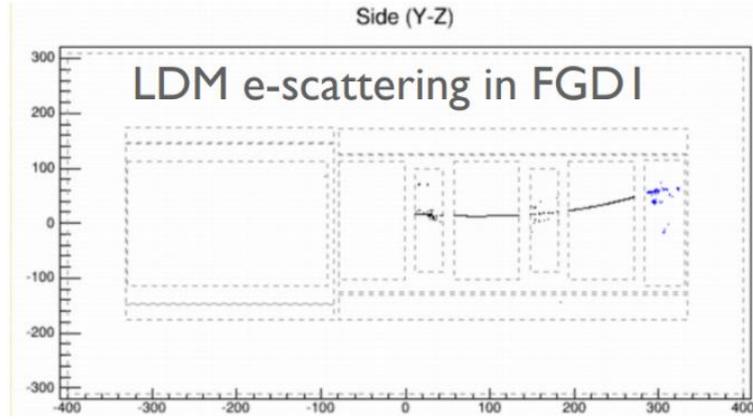


Рис. 2. Событие рассеяния тёмного фотона на электроне в FGD1

Литература

1. *Ade P. A.R. et al. (Planck Collaboration)*. Planck 2013 results. I. Overview of products and scientific results // *Astronomy and Astrophysics journal*. EDP Sciences, 2013. P. 5062. arXiv:1303.5062.
2. *Fabbrichesi M., Gabrielli E., Lanfranchi G.* The Physics of the Dark Photon. SpringerBriefs in Physics, 2020. DOI: 10.1007/978-3-030-62519-1.

УДК 539.12

Процедура отбора событий $e^+e^- \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$ и проверка корректности процедуры ISR-коррекции на Монте-Карло данных на энергии 2.125 ГэВ

П.А. Егоров^{1,2}, Ю.А. Нефёдов²

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Объединенный институт ядерных исследований

Нами была реализована процедура отбора событий $e^+e^- \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$, а также процедура ISR-коррекции [1]. При этом отбираются события с распадом η по двум каналам: $\eta \rightarrow 2\gamma$ и $\eta \rightarrow 3\pi^0 \rightarrow 6\gamma$. Второй канал, имея значительно меньший уровень шума, но при этом и меньшую эффективность отборов, используется для проверки результатов первого канала. Монте-Карло данные на энергии 2.125 ГэВ были сгенерированы *BesEvtGen* генератором [2] равномерно по фазовому объему. Процедура отбора событий состоит в следующем.

- Отбор заряженных треков:
 - Расстояние от заряженного трека до вершины взаимодействия: $|V_{xy}| < 1$ см, $|V_z| < 10$ см;
 - Полярный угол: $|\cos\theta| < 0.93$;
 - $|\cos\alpha(\vec{p}_{\pi^+}, \vec{p}_{\pi^-})| < 0.95$, где α – угол между импульсами пионов;
 - Для событий $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta \rightarrow \pi^+\pi^-\gamma\gamma$:
 $Prob(\pi) > \max(Prob(K), Prob(p), 0.001)$, где PID-вероятность *Prob* включает информацию от dE/dx и TOF систем.
- Отбор нейтральных треков:
 - Минимум два фотона для того, чтобы событие считалось кандидатом в $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\gamma\gamma$, и минимум шесть фотонов для того, чтобы событие считалось кандидатом в $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0\pi^0\pi^0$.
 - Энерговыделение в электромагнитном калориметре: минимум 25 МэВ в «barrel» или минимум 50 МэВ в «endcap».
 - Угол между рассматриваемым нейтральным треком и ближайшим к нему заряженным треком должен быть больше 10° .
- Кинематический фит:
 - 4-импульс системы $(\pi^+\pi^-N\gamma)$ должен совпадать с полным 4-импульсом (p_{e^+,e^-}) ; здесь $N = 2$ или $N = 6$ в зависимости от того, кандидатом на какой процесс является рассматриваемое событие.
 - Событие отбрасывается, если $\chi_{4C}^2 < \chi_{limit}^2$, где χ_{limit}^2 выбирается отдельно для каждой энергии и каждого процесса.
 - Если количество фотонов в событии больше минимально необходимого, выбирается оптимальный набор с наименьшим χ_{4C}^2 .
- Отбор по квадрату инвариантной массы фотонов:

○ $|M_{N\gamma}^2 - M_\eta^2| < 3 \times w_{N\gamma}$ – сигнальная область.

○ $6 \times w_{N\gamma} < |M_{N\gamma}^2 - M_\eta^2| < 9 \times w_{N\gamma}$ – сайдбенд для оценки фона.

Здесь $w_{N\gamma}$ – характерный параметр, изменяемый в зависимости от энергии и рассматриваемого процесса. В частности, для энергии 2.125 ГэВ $w_{2\gamma} = 0.008 \text{ ГэВ}^2/c^4$, $w_{6\gamma} = 0.009 \text{ ГэВ}^2/c^4$.

Также нами была реализована процедура вычитания сайдбендов для оценки оставшегося после отборов фона и для того, чтобы лучше оценить число событий в пике распределения квадратов инвариантных масс фотонов.

После отборов мы заполнили диаграммы Далица в координатах $M_{inv(\pi^+\pi^-)}^2, M_{inv(\pi^+\eta)}^2$ для Монте-Карло данных отдельно в сигнальной и сайдбенд областях. Это позволило нам получить эффективность отборов по формуле

$$\varepsilon_{MC}(x, y) = \frac{N_{finMC}^{signal}(x, y) - N_{finMC}^{side-band}(x, y)}{N_{initialMC}(x, y)}$$

Здесь $N_{finMC}^{signal}(N_{finMC}^{side-band})$ – события из сигнальной (сайдбенд) области, $N_{initialMC}$ – все сгенерированные события. Полученные эффективности показаны на рис. 1.

Для измерения наблюдаемых сечений использовалась следующая формула:

$$\sigma_{vis} = \frac{\sum_{x,y} N_{data}(x, y) - N_{sb}(x, y)}{L_{int} \cdot Br} \cdot \varepsilon_{MC}(x, y), \quad x = M_{int}^2$$

Здесь $N_{data}(x, y)$ заполнена событиями из сигнальной области, $N_{sb}(x, y)$ заполнена событиями из сайдбендов, $\varepsilon_{MC}(x, y)$ – 2D-эффективность, L_{int} – интегральная светимость, Br – вероятность соответствующего распада, взятая из PDG [3]:

$$Br(\eta \rightarrow 2\gamma) = 39.41 \pm 0.20\%, \quad Br(\eta \rightarrow 3\pi^0) = 32.68 \pm 0.23\%.$$

Наконец, нами была реализована процедура учета ISR-поправок для получения борновских сечений из наблюдаемых сечений (Iterative MC Weighting method). Полная процедура описана в [1]. Для демонстрации корректности наших процедур отборов и ISR-коррекции мы использовали Монте-Карло данные в качестве входных экспериментальных данных. Полученное значение борновского сечения в пределах погрешности совпадает с заложенным при генерации Монте-Карло данных, что демонстрирует корректность описанных нами процедур.

Мы выражаем благодарность группе BESIII-ЛЯП ОИЯИ за множество полезных обсуждений.

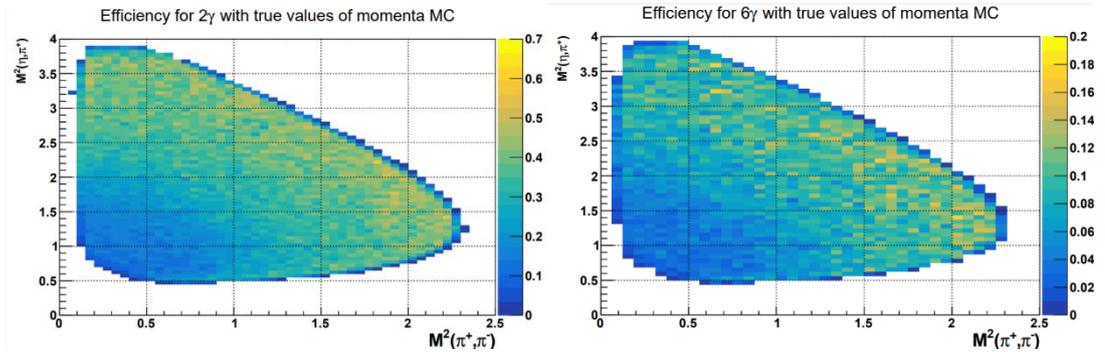


Рис. 1. 2D-эффективности для энергии 2.125 ГэВ. Слева – эффективность для процесса $\eta \rightarrow 2\gamma$, справа – эффективность для процесса $\eta \rightarrow 3\pi^0$

Литература

1. Sun W., Liu T., Jing M., Wang L., Zhong B. and Song W. An iterative weighting method to apply ISR correction to $e+e-$ hadronic cross-section measurements // Front. Phys. 2021 V. 16. N 6. 64501.
2. doi:10.1007/s11467-021-1085-6.
3. Ping R.G. Event generators at BESIII // Chin. Phys. C 2008 V. 32. N 8 P. 599.
4. doi:10.1088/1674-1137/32/8/001.
5. Zyla P. A. et al. [Particle Data Group] Review of Particle Physics // PTEP 2020 N 8. 083C01.
6. doi:10.1093/ptep/ptaa104 hadronic cross-section measurements.

Кластеризация спектаторной материи в столкновениях релятивистских ядер

Р.С. Непейвода^{1,2}, А.О. Светличный^{1,2}, Н.А. Козырев^{1,2}, И.А. Пшеничников^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт ядерных исследований РАН

Характеристики столкновений тяжелых ядер при высоких энергиях, включая условия образования в них кварк-глюонной плазмы, существенно зависят от степени перекрытия ядер – центрально-сти. Одним из способов определения в эксперименте центральности и плоскости реакции каждого события является детектирование нуклонов [1] и ядерных фрагментов [2, 3] – спектаторной ядерной материи, оказавшейся вне перекрытия. В центральных столкновениях деформированных тяжелых ядер измерение количества спектаторных нуклонов позволяет оценить взаимную ориентацию ядер до столкновения [4]. В связи с планами изучения столкновений легких ядер кислорода в будущих сеансах на ЛНС [5] возникает необходимость описания спектаторной материи в ^{16}O – ^{16}O столкновениях с учетом малого количества нуклонов в ней и возможного влияния кластерной структуры ^{16}O на их выходы. Спектаторные нейтроны и протоны регистрируются в эксперименте ALICE с различной эффективностью [1], соответственно, в нейтронных и протонных калориметрах. Эффективности регистрации спектаторных нуклонов и фрагментов передним калориметром FHCAL в эксперименте MPD на NICA [6] также ожидаются неодинаковыми. Поэтому для моделирования сигналов указанных калориметров необходимо адекватное теоретическое описание п/р-отношения для свободных нуклонов, их доли по отношению к фрагментам-спектаторам, а также распределений фрагментов по их заряду и массе.

Как было показано авторами настоящей работы ранее [2, 3], модель Abrasion-Ablation Monte Carlo for Colliders (ААМСС) в целом описывает распределения спектаторных нуклонов и фрагментов предполагая две основные стадии их формирования. На первой стадии (abrasion) с помощью модели Glauber Monte Carlo [7] разыгрываются столкновения отдельных нуклонов каждого из взаимодействующих ядер, а избежавшие столкновений нуклоны считаются спектаторами и образуют возбужденные префрагменты. На второй стадии (ablation) с помощью статистических моделей распада возбужденных ядер из библиотеки Geant4 [8] разыгрывается распад каждого из двух префрагментов относящихся соответственно к ядру-снаряду и ядру-мишени. В работах [2, 3] спектаторная материя от каждого из ядер после стадии abrasion рассматривается в качестве единой системы, в которой к моменту распада предполагается наступление термодинамического равновесия благодаря интенсивному взаимодействию составляющих её нуклонов. Однако в центральных столкновениях ядер спектаторная материя имеет выстроенную вдоль полуокружности серповидную форму, и по причине низкой связности установление термодинамического равновесия в такой системе затруднено. Можно ожидать перколяционного разделения серповидной спектаторной материи на отдельные кластеры в результате поперечного расширения. В работах [9, 10] указывалось на то, что характер такой кластеризации существенно зависит от энергии возбуждения префрагмента.

Для учета особенностей геометрии префрагментов в центральных столкновениях ядер в ААМСС в настоящей работе был добавлен алгоритм их предравновесной кластеризации, основанный на построении минимального остовного дерева (MST) [11]. Для учёта расширения префрагмента в алгоритме кластеризации MST введена феноменологическая аппроксимация плотности ядерной материи в виде степенной функции, которая отражает зависимость критического параметра кластеризации d от энергии возбуждения. Как показано на рис. 1, использование MST кластеризации увеличивает выход свободных нуклонов и улучшает описание данных по множественности фрагментов от взаимодействия ^{197}Au с фотоэмульсией [12]. Расчеты с MST лучше описывают измеренные [13] вероятности образования вторичных ядер He и Li в результате фрагментации ^{16}O , сохраняя удовлетворительное описание V и N , рис. 2. Однако остающиеся расхождения с экспериментом в отношении V и C указывают на необходимость учета альфа-частичной кластеризации в ^{16}O , которую планируется учесть в будущих версиях ААМСС-MST.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-02-40035-мега.

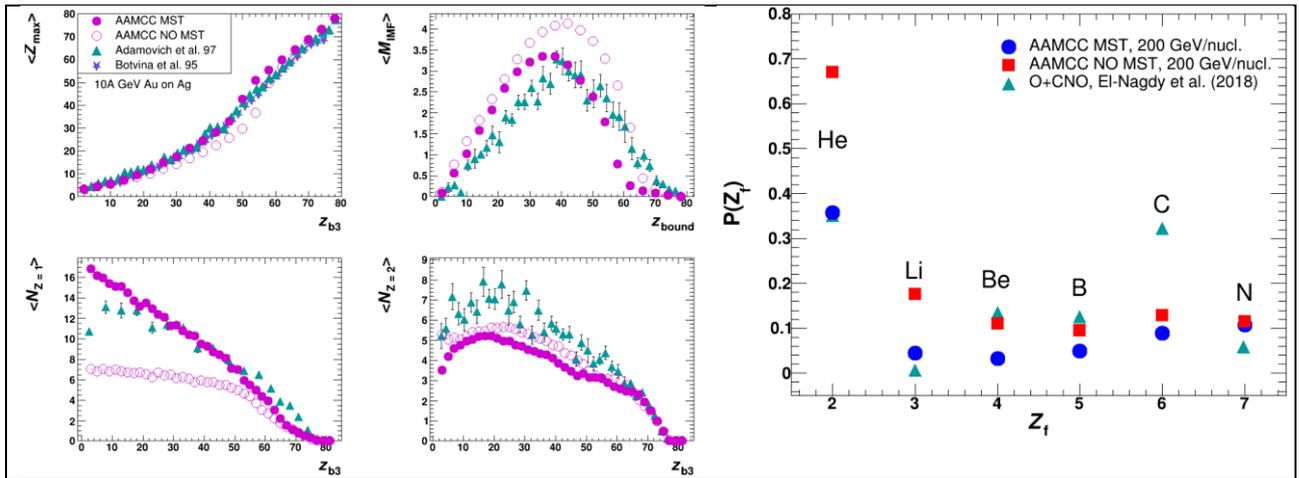


Рис. 1: Зависимости множественности фрагментов от суммы их зарядов, вычисленные с помощью ААМСС и ААМСС-MST в сравнении с данными коллаборации EMU-01/12 [12] по фрагментации 10.7А ГэВ ^{197}Au в ядерной фотоэмульсии НИКФИ-BR2 (слева). Вероятности выхода фрагментов с определённым зарядом в столкновениях ядер кислорода в моделях ААМСС и ААМСС-MST в сравнении с экспериментальными данными [13] (справа)

Литература

1. *Puddu G. [et al.]*. The zero degree calorimeters for the ALICE experiment // Nucl. Instrum. Methods A. 2007. V. 581. P. 397–401.
2. *Svetlichnyi A., Nepeyvoda R., Pshenichnov I.* Using spectator matter for centrality determination in nucleus-nucleus collisions // Particles. 2021. V. 4. P. 227–235.
3. *Svetlichnyi A., Pshenichnov I.* Formation of Free and Bound Spectator Nucleons in Hadronic Interactions between Relativistic Nuclei // Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 2020. V. 84, № 8. P. 911–916.
4. *Giacalone G.* Observing the Deformation of Nuclei with Relativistic Nuclear Collisions // Phys. ReV. Lett. 2020. V. 124. P. 202301.
5. *Brewer J. [et al.]*. Opportunities of OO and pO collisions at the LHC // Preprint arXiv:2103.01939. 2021.
6. *Abraamyan K. et al.* The MPD detector at the NICA heavy-ion collider at JINR // Nucl. Instrum. Methods A. 2011. V. 628. P. 99–102.
7. *Loizides C. [et al.]*. Monte Carlo Glauber predictions at present and future nuclear collisions // Phys. ReV. C. 2018. V. 97. P. 054910.
8. *Allison J. [et al.]*. Recent developments in Geant4 // Nucl. Instr. and Meth. A. 2016. V. 835. P. 186–225.
9. *De J. [et al.]*. Nuclear expansion with excitation // Physics Letters, Section B: Nuclear, Elementary Particle and High-Energy Physics. 2006. V. 638. N 2–3. P. 160–165.
10. *Viola V. [et al.]*. Breakup densities of hot nuclei // Physical Review Letters. 2004. V. 93. N 13. P. 1–4.
11. *Robert C.* Shortest connection networks and some generalizations // The Bell System Technical Journal. 1957. V. 36(6). P. 1389–1401.
12. *Adamovich M.I. [et al.]*. Multifragmentation of gold nuclei in the interactions with photoemulsion nuclei at 10.7 GeV/nucleon // Z. Phys. 1997. V. 359. P. 277–290.
13. *El-Nagdy M. [et al.]*. Channels of projectile fragmentation of ^{16}O nucleus in nuclear emulsion // J. Phys. Commun. 2018. V. 2.

УДК 539.126.6

Получение сигнала В-мезона в распаде $B^0 \rightarrow J/\psi\phi K_s^0$ на данных 2016–2018 годов эксперимента CMS и изучение характерных величин распада

Д.М. Сокол

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Одной из задач Большого Адронного Коллайдера является амплитудный анализ распадов, изучение инвариантных масс. Это может быть весьма полезным как для лучшего понимания природы сильного взаимодействия в теориях Стандартной Модели и квантовой хромодинамики, так и для поиска Новой Физики.

За последние годы экспериментами БАК (в основном LHCb) особый интерес представляют резонансные распады. Их изучение позволяет находить новые экзотические состояния. Все вышесказанное дает мотивацию для изучения вопроса восстановления хорошего сигнала B^0 мезона на последних данных эксперимента CMS. Отобранные сигнальные события могут быть впоследствии использованы для поиска возбуждений и новых состояний.

В настоящей работе представлены результаты по получению сигнала B^0 через восстановление следующего канала распада $B^0 \rightarrow J/\psi \phi K_s^0$, $J/\psi \rightarrow \mu^+ \mu^-$, $\phi \rightarrow K^+ K^-$. Были использованы данные, набранные детектором CMS БАК [2] в ходе RunII работы коллайдера (2016–2018 годы) в протон-протонных столкновениях с энергией в 13 ТэВ в системе центра масс.

При восстановлении кандидатов сначала ищутся два мюона с противоположными зарядами, треки которых фитируются в общую вершину для получения $J/\psi \rightarrow \mu^+ \mu^-$. Затем выбираются два адронных трека с противоположными зарядами для восстановления распада $\phi \rightarrow K^+ K^-$. Затем выбираются два адронных трека с противоположными зарядами для восстановления распада нейтрального V^0 - K_s^0 кандидата, с гипотезой пионов. Они фитируются в общую вершину распада K_s^0 . После этого J/ψ , ϕ и K_s^0 кандидаты комбинируются вместе для восстановления B^0 кандидата и его траектории, причем выбирается наилучшая первичная вершина (PV) распада (наибольший 3D-косинус между направлением на PV и импульсом b -адрона).

Как в процессе восстановления распада, так и в ходе анализа полученных данных, для получения сигнальных событий используются следующие критерии отбора к частицам и их трекам:

- *Отбор мюонов:* $p_T(\mu^\pm) > 4$ ГэВ, а также вероятность фита димюонной вершины $(\mu^+ \mu^-)_{\text{vtxprob}} > 0.01$, и массовое окно димюонного кандидата: $3.04 \text{ ГэВ} < m(\mu^+ \mu^-) < 3.15 \text{ ГэВ}$ для $J/\psi \rightarrow \mu^+ \mu^-$ $J/\psi_{\text{detachsign}} > 3$, $p_T(J/\psi) > 7$ ГэВ;
- *Отбор ϕ :* массовое окно $1.01 \text{ ГэВ} < m(\phi) < 1.03 \text{ ГэВ}$, $p_T(K^\pm) > 0.8$ ГэВ
- *Отбор K_s^0 :* вероятность фита в общую вершину $(K_s^0)_{\text{vtxprob}} > 0.01$, $p_T(K_s^0) > 1$ ГэВ, косинусы больше, чем 0.99 (в поперечной плоскости);
- *Отбор B^0 :* вероятность фита B^0 с димюонным кандидатом $(B^0)_{\text{vtxprob}} > 0.01$, значимость отлета в поперечной плоскости $(B^0)_{\text{detachsign}} > 5$, $p_T(B^0) > 10$ ГэВ, массовое окно $5.15 \text{ ГэВ} < m(B^0) < 5.45 \text{ ГэВ}$, а также косинусы углов между направлением на PV и импульсом $p_T(B^0)$, между направлением на вершину распада B^0 и импульсом больше, чем 0.99 (в поперечной плоскости).

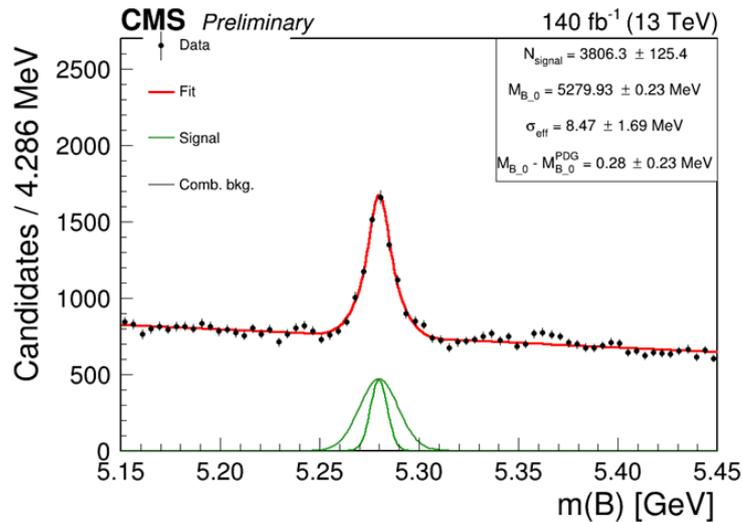


Рис. 1: Распределение по инвариантной массе отобранных кандидатов. Чёрные точки показывают данные, красная сплошная линия – полную аппроксимирующую функцию, зелёная – сигнал

На рис. 1. изображено распределение по инвариантной массе $J/\psi\phi K_s^0$ отобранных кандидатов. Наблюдается значительный пик в районе PDG-массы B^0 -мезона [1] – 5279.58 ± 0.17 МэВ. Это распределение с использованием ПО RooFit [3] аппроксимируется суммой сигнальной и фоновой компонент, где сигнал описывается функцией Гаусса, а фон – полиномом Бернштейна 1-й степени, со свободными при фитировании параметрами. Результаты также представлены на рис. 1. Аппроксимация дает 3806.3 ± 125.4 сигнальных событий, а полученная из фита масса B^0 -мезона, 5279.93 ± 0.23 МэВ, находится в хорошем согласии с данными PDG.

Подобный анализ проводился экспериментом LHCb в распаде $B^+ \rightarrow J/\psi\phi K^+$ [4]. Полученный качественный сигнал $B^0 \rightarrow J/\psi\phi K_s^0$ дает хорошие основания полагать, что за счет бóльшей статистики отобранные B^0 кандидаты могут быть эффективно использованы для поиска новых резонансных состояний в системах $J/\psi\phi$ и $J/\psi K_s^0$, что и является ближайшими планами авторов настоящей работы.

Литература

1. Particle Data Group, *Tabanashi M. et al.* Review of Particle Properties // Phys. ReV. D. 2018. V. 98. P. 030001.
2. CMS Collaboration, *Chatrchyan S. et al.* The CMS experiment at the CERN LHC // JINST. 2008. V. 3. P. S08004.
3. *Verkerke W., Kirkby D.P.* The RooFit toolkit for data modeling // eConf C. 2003. V. 0303241. P. MOLT007.
4. LHCb Collaboration, *Aaij R. et al.* Amplitude analysis of $B^+ \rightarrow J/\psi\phi K^+$ decays // Phys. ReV. D 95, 012002 (2017).

УДК 53.01

Критерий бесконечной гамма обратной связи в модели Дваера

А.С. Седельников^{1,2}, Д.И. Землянская^{1,3}, Е.М. Стадничук^{1,4}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

³Институт ядерных исследований РАН

⁴Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Одной из важнейших задач в атмосферной физике высоких энергий является построение модели гамма вспышек земного происхождения (Terrestrial Gamma-ray Flashes, TGF). Установлено, что лавины убегающих электронов, ускоряемые электрическим полем в грозовых облаках, являются источниками этих вспышек [1]. Однако электронов, образующихся в лавинном процессе, оказывается недостаточно для описания TGF, экспериментально наблюдаемых из космоса. Джозефом Дваером была предложена модель обратной связи, увеличивающая число частиц в лавинах [2]. Одним из ключевых механизмов в модели Дваера является гамма обратная связь, вклад которой увеличивается с ростом напряжённости электрического поля [3]. В основе гамма обратной связи лежит явление разворота фотонов тормозного излучения, образующегося при ускорении электронов в поле облака. Эти фотоны могут рождают новые электроны в начале области образования лавины, что приводит к образованию вторичных лавин.

В данной работе был выведен критерий образования бесконечной обратной связи за счёт разворота тормозных гамма квантов. Рассмотрим ячейку длины L с постоянным и однородным электрическим полем. Пусть λ_{RREA} – длина экспоненциального нарастания лавины; λ_γ – длина пробега убегающего электрона до рождения гаммы; $\lambda_{\gamma \rightarrow e}$ – длина пробега гаммы до рождения убегающего электрона; λ_x – длина ослабления пучка гамма квантов; P_γ – вероятность разворота гаммы; p_e – вероятность разворота электрона. Эти параметры зависят от электрического поля и плотности воздуха. Тогда полученный критерий обратной связи выражается неравенством

$$\frac{p_e P_\gamma}{\lambda_{\gamma \rightarrow e} \lambda_\gamma} \left(\frac{\lambda_{RREA} \lambda_x}{\lambda_x - \lambda_{RREA}} \right)^2 \left(e^{\frac{L(\lambda_x - \lambda_{RREA})}{\lambda_x \lambda_{RREA}}} - 1 - \frac{L(\lambda_x - \lambda_{RREA})}{\lambda_x \lambda_{RREA}} \right) > 1.$$

Полученное соотношение может быть использовано при дальнейшем изучении вклада бесконечной гамма обратной связи в динамику электронных лавин.

Литература

1. *Dwyer J.R. et al.* A study of X-ray emission from laboratory sparks in air at atmospheric pressure // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. 2008. V. 113, N D23.
2. *Dwyer J.R.* A fundamental limit on electric fields in air // *Geophysical Research Letters*. 2003. V. 30, N 20.
3. *Бабич Л.П.* Лавина релятивистских убегающих электронов // *Успехи физических наук*. 2020. Т. 190, № 12. С. 1261–1292.

УДК 53.043

Возрастание тяжелых нуклидов в воздухе во время снегопадов

А.А. Лагуткина¹, Ю.В. Стенькин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт ядерных исследований РАН

В январе 2021 года на установке *n*-БНО (Баксанская Нейтринная Обсерватория) был обнаружен новый эффект – возрастание тяжелых нуклидов в воздухе экспериментального зала во время снегопадов с метелью.

Наблюдение эффекта производилось при помощи эн-детектора, разработанного в ИЯИ РАН для эксперимента PRISMA для детектирования двух основных компонент ШАЛ – адронной (нейтронов) и электронной (рис. 1). Детекторы данного типа способны регистрировать как тепловые нейтроны («n»), так и одновременное прохождение нескольких заряженных частиц («ch») (порог регистрации ~3 частицы). Подробное описание его строения и принципа работы представлено в статье [1].

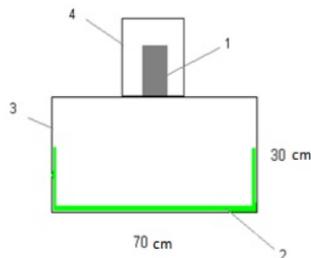


Рис. 1. Схема электронно-нейтронного (эн) детектора, 1 – ФЭУ, 2 – сцинтиллятор $ZnS(Ag)+^6LiF$, 3 – алюминиевый корпус, 4 – стальной кожух

Эффект состоит в следующем: 27.01.2021–29.01.2021 и 05.02.2021 года на Баксане в районе БНО наблюдались обильные снегопады, сопровождавшиеся сильным ветром. В эти же дни на трех из четырех эн-детекторов, установленных внутри здания, наблюдалось четко выраженное увеличение количества сигналов заряженной компоненты. На рис. 2 можно видеть этот эффект в виде пиков в вышеуказанные дни на нижнем графике (S_n и S_{ch}), который представляет собой суточную сумму всех нейтронных и заряженных сигналов на трех детекторах, установленных в помещении. Данные с мюонного детектора, расположенного под землей, вынесены на отдельный график (MD), не коррелируют с метелями и почти не используются для анализа явления.

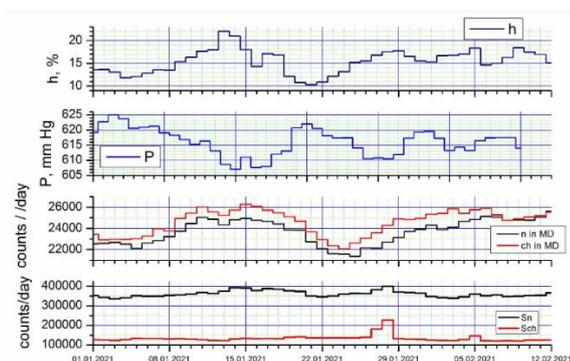


Рис. 2. Суточные графики влажности воздуха и давления в БНО, а также отсчетов заряженной компоненты в туннеле мюонного детектора (MD) и в трех других (S) эн-детекторах

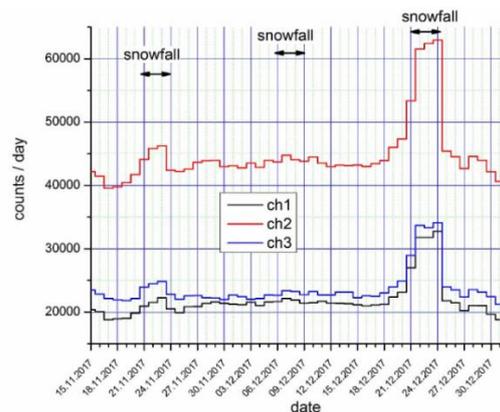


Рис. 3. Заряженные компоненты в эн-детекторах в период 15.11.2017–30.12.2017

В ходе исследования оказалось, что подобные «снежные» эффекты имели место и ранее. Например, на рис. 3 приведены графики для ch-компоненты в ноябре–декабре 2017 года, на которых также отмечены снегопады в соответствующие дни. Можно заметить, что эффект имеет место не при любом снегопаде, а именно во время сильных метелей.

В книге Арабаджи В.И. [1] выдвигается теория, что во время метели в результате «трения» (столкновения) между частями снежинок (плоской гранью одного кристалла льда и острым выступом другого) на них возникает заряд. Более мелкие снежинки заряжаются положительно, более крупные – отрицательно. При выпадении на крышу здания они создают электрическое поле между землей и потолком, и детекторы в помещении оказываются как бы внутри «конденсатора». Для объяснения обнаруженного эффекта была выдвинута гипотеза: если крыша заряжается положительным зарядом, то это должно приводить к более быстрому осаждению имеющихся в воздухе положительно заряженных аэрозолей [3], содержащих тяжелые нуклиды (Bi-214 и Pb-214), являющиеся продуктами распада радона.

Чтобы проверить эту гипотезу, нужно провести модельный эксперимент, в котором детектор будет помещен в электрическое поле, допустим, между заряженной металлической пластиной и землей. В данный момент этот эксперимент проводится на базе лаборатории ИЯИ при помощи эн-детектора, аналогичного баксанским. Получены предварительные результаты, которые будут представлены в докладе.

Литература

1. *Sten'kin Y.V.*, Nuclear Track Detectors: Design, Methods and Applications. New York: Nova Science, 2010, ChaP. 10, P. 253.
2. *Арабаджи В.И.*, Загадки простой воды. М.: Знание, 1973. 50 с.
3. *Stenkin Yu.V., et al.* Sporadic increases of radioactive aerosols as a possible reason for heavy nuclides enhancements recorded with the en-detectors // Journal of Environmental Radioactivity. 222, 106335 (2020).

УДК 539.12

Поиск частиц темной материи в эксперименте ATLAS на LHC

Д. Пуджа

Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова» Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

Одной из актуальных задач, стоящих перед экспериментами на Большом адронном коллайдере, который расположен в Европейском центре ядерных исследований (ЦЕРН), является поиск частиц темной материи. В экспериментах на коллайдере изучается процесс образования частиц темной материи в различных процессах, например при аннигиляции кварк-антикварковой пары, при котором рождаются частицы темной материи, но не регистрируются в детекторе. Для идентификации таких событий необходимо образование какой-то дополнительной частицы Стандартной Модели до взаимодействия, которая может быть зарегистрирована непосредственно или же по продуктам распада. Такой канал называется Mono-X, где в процессе аннигиляции кварк-антикварковой пары образуется промежуточный переносчик взаимодействия, который в дальнейшем распадается на частицы кандидаты в

темную материю, при этом до аннигиляции кварк-антикварковой пары один из кварков испускает или векторный бозон W/Z, фотон γ , или глюон g, которые могут быть зарегистрированы детектором [1–3]. Дополнительно проводятся поиски переносчика взаимодействия между частицами темной материи и частицами Стандартной Модели, так как эта промежуточная частица может распасться на частицы Стандартной Модели.

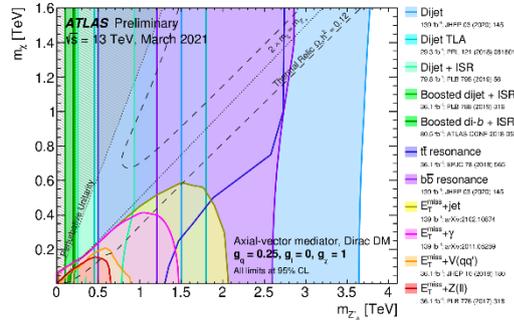


Рис. 1. Пределы на массу частицы темной материи, как функция массы промежуточной частицы, полученные в эксперименте ATLAS для различных процессов. Расчеты выполнены с учетом констант взаимодействия медиатора с частицами темной материи $g_{DM}=1.0$ и с кварками $g_q=0.25$

На рис. 1 представлен результат вычисления пределов на массы частиц темной материи в зависимости от массы аксиально-векторного медиатора, полученных в эксперименте ATLAS для процессов Mono-X [4]. Пределы были получены для значений константы взаимодействия медиатора с частицами Стандартной Модели $g_q=0.25$ и с частицами темной материи $g_\chi=1$. Наиболее сильное ограничение на массу медиатора получено при анализе событий с образованием двух струй.

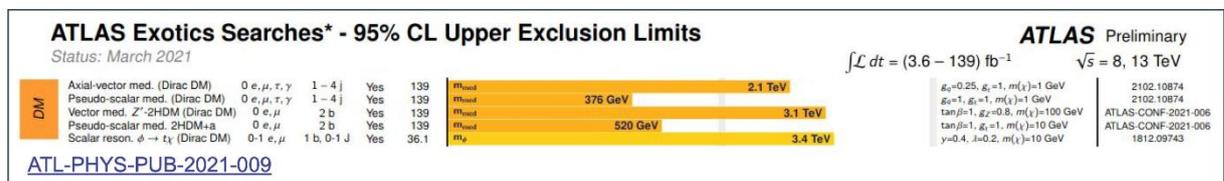


Рис. 2. Верхние пределы для массы медиатора, полученные в эксперименте ATLAS, при интерпретации данных с использованием различных моделей

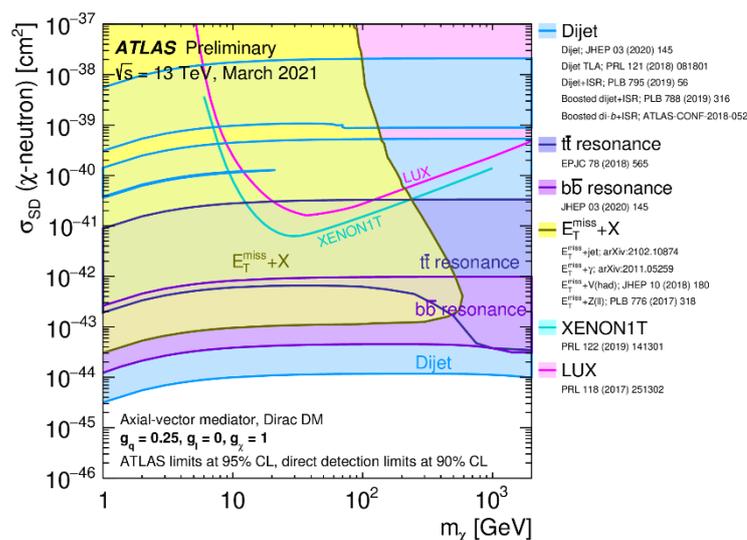


Рис. 3. Верхние пределы для спин-зависимых сечений рассеяния частиц темной материи в зависимости от массы, полученные в экспериментах по прямому поиску, в сравнении с результатами эксперимента ATLAS

В эксперименте также проводилось сравнение результатов, полученных экспериментом ATLAS, с результатами экспериментов по прямому поиску [4]: XENON1T, LUX. На рис. 2 представлены результаты измерения верхних пределов спин-зависимых сечений рассеяния частиц темной материи в зависимости от их массы, которые были получены при анализе процессов Моно-Х, двухструйных, а также $t\bar{t}$ и $b\bar{b}$ резонансных событий, в сравнении с результатами, полученными в экспериментах по прямому поиску. Так как в эксперименте ATLAS частицы темной материи образуются в результате аннигиляции кварк-антикварковой пары, а в прямых экспериментах измеряются верхние пределы на сечения рассеяния частиц темной материи на ядрах, то для проведения сравнения результатов полученные пределы для сечений были пересчитаны [5].

На рис. 3 приведены верхние пределы для массы медиатора при интерпретации данных с использованием различных моделей [6].

Литература

1. *Aaboud M., et al. (ATLAS Collaboration)*. Search for an invisibly decaying Higgs boson or dark matter candidates produced in association with a Z boson in pp collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector. <http://cds.cern.ch/record/2273610/files/ATLAS-CONF-2017-040.pdf>
2. *Aaboud M., et al. (ATLAS Collaboration)*. Search for dark matter at $\sqrt{s} = 13$ TeV in final states containing an energetic photon and large missing transverse momentum with the ATLAS detector // *The European Physical Journal. C*. 2017. V. 77. N 6. P. 393.
3. *Aaboud M., et al. (ATLAS Collaboration)*. Search for dark matter and other new phenomena in events with an energetic jet and large missing transverse momentum using the ATLAS detector. <http://cds.cern.ch/record/2273876/files/ATLAS-CONF-2017-060.pdf>
4. *ATLAS Collaboration*. Dark matter summary plots for s-channel mediators, update March 2021: <http://cdsweb.cern.ch/record/2758386/files/ATL-PHYS-PUB-2021-006.pdf>
5. *Boveia A., et al.* Recommendations on presenting LHC searches for missing transverse energy signals using simplified s-channel models of dark matter // *Phys.Dark UniV*. 27 (2020)
6. *ATLAS Collaboration*, Summary Plots for Heavy Particle Searches and Long-lived Particle Searches, update March 2021: <http://cdsweb.cern.ch/record/2758784/files/ATL-PHYS-PUB-2021-009.pdf>

УДК 539.12

Прецизионное измерение спектра поперечного импульса p_T^l ($l = e, \mu$) и угловой переменной ϕ_η^* в процессе распада Z-бозона на лептонную пару в эксперименте ATLAS

А.Е. Ежилов

Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова» Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

Измерение спектров поперечного импульса Z-бозона p_T и угловой переменной ϕ_η^* позволяет выполнить их сравнение с теоретическими расчетами, полученными с учетом поправок различных порядков пертурбативной квантовой хромодинамики (КХД), и тем самым проверить расчеты в рамках пертурбативной КХД. Кроме того, точное знание спектра поперечных импульсов Z-бозона необходимо при изучении процессов, в которых распад $Z \rightarrow ll$ является фоновым процессом.

В данной работе также выполнено измерение спектра ϕ_η^* , которая коррелирует с p_T Z-бозона, но характеризуется лучшим экспериментальным разрешением, так как зависит только от углов разлета лептонов в конечном состоянии:

$$\phi_\eta^* = \tan\left(\frac{\pi - \Delta\phi}{2}\right) \cdot \sin(\theta_\eta^*), \text{ где } \theta_\eta^* = \arccos\left(\tanh\left(\frac{\eta^- - \eta^+}{2}\right)\right),$$

где $\Delta\phi$ – азимутальный угол между лептонами, а η^+ и η^- – псевдобыстрота положительно и отрицательно заряженных лептонов. Таким образом, использование переменной ϕ_η^* позволяет уменьшить вклад систематических ошибок по поперечному импульсу в области малых p_T .

Для анализа использовались данные, соответствующие интегральной светимости 36,1 фб⁻¹, накопленные в 2015 и 2016 годах работы Большого адронного коллайдера на детекторе ATLAS[1], при энергии соударения протон-протонных пучков 13 ТэВ. Для измерений отбирались события распадов Z-бозонов на электрон-позитронную (ee) и мюонную ($\mu\mu$) пары. Измерения выполнялись в области инвариантных масс пар лептонов, близких к массе Z-бозона (66–116 ГэВ), во всем доступном

диапазоне их быстрой. Полученные спектры по p_T и ϕ_η^* искажаются за счет акцептанса детектора и конечного разрешения детектора. Для восстановления неискаженных детектором спектров осуществлялась процедура обратной свертки. Измеренные дифференциальные сечения в электронном и мюонном каналах объединялись с помощью χ^2 минимизации с использованием best linear unbiased estimator prescription (BLUE). На рис. 1 представлены результаты измеренных дифференциальных сечений в электронном и мюонном каналах, а также результат их объединения. Суммарные систематические ошибки показаны синей заштрихованной областью.

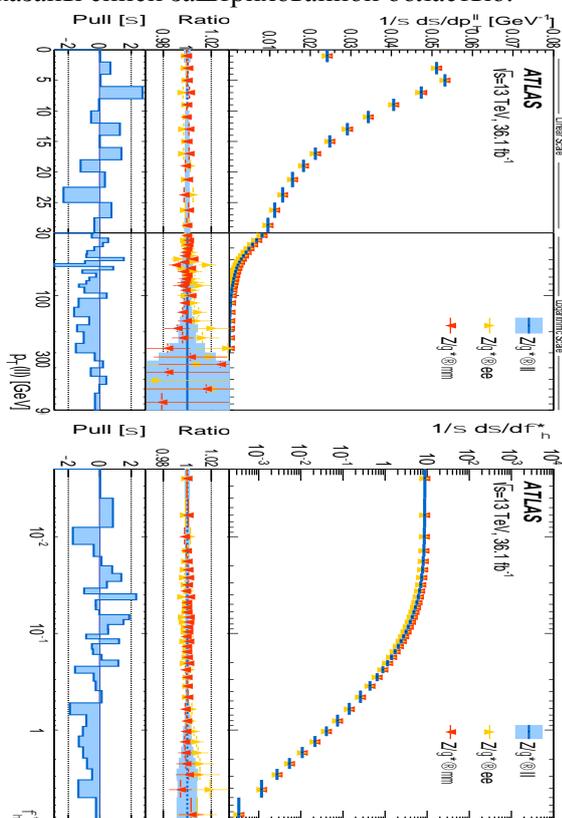


Рис. 1. Сравнение дифференциальных поперечных сечений в электронном и мюонных каналах, а также с комбинированным результатом как функция p_T (слева) и ϕ_η^* (справа)

Полные измеренные сечения для электронного и мюонного каналов в акцептансе детектора, а также объединенный результат представлены в таблице [2]:

Канал	Измеренное сечение
$Z \rightarrow ee$	$738.3 \pm 0.2^{\text{stat}} \pm 7.7^{\text{syst}} \pm 14.8^{\text{lumi}}$ пб
$Z \rightarrow \mu\mu$	$730.8 \pm 0.2^{\text{stat}} \pm 11.3^{\text{syst}} \pm 14.6^{\text{lumi}}$ пб
$Z \rightarrow ll$	$736.2 \pm 0.2^{\text{stat}} \pm 6.4^{\text{syst}} \pm 14.7^{\text{lumi}}$ пб

На рис. 2 представлено сравнение дифференциальных поперечных сечений с результатами различных теоретических расчетов. В результате обработки данных, накопленных при энергии соударения 7 ТэВ в 2011 г. с помощью детектора ATLAS, были оптимизированы наборы параметров партонных ливней (AZ-тюнинг), чтобы достичь оптимального согласия спектров по p_T и ϕ_η^* . Для генераторов Pythia8 и Powheg+Pythia наблюдается хорошее согласие и с текущими результатами при энергии 13 ТэВ в области небольших p_T (ϕ_η^*). Генератор Sherpa, в котором используется большая множественность партонов при вычислении матричных элементов и другая модель адронизации, наоборот, лучше описывает полученные данные в области более высоких p_T (ϕ_η^*). Наиболее точное согласие наблюдается между полученными результатами и предсказанием, полученным с помощью генератора RadISH (расчеты в NNLO+N³LL приближениях).

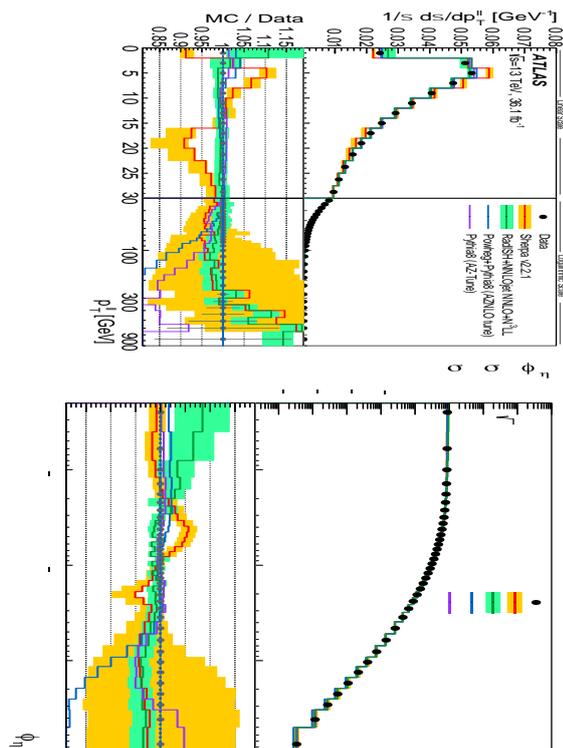


Рис. 2. Сравнение дифференциальных поперечных сечений с результатами теоретических расчетов, полученных с помощью различных Монте-Карло генераторов как функция p_T (слева) и ϕ^* (справа)

Литература

1. *Aaboud M., et al. (ATLAS Collaboration). The ATLAS Experiment at the CERN Large Hadron Collider // JINST 3 (2008) S08003.*
2. *Aaboud M., et al. (ATLAS Collaboration). Measurement of the transverse momentum distribution of Drell–Yan lepton pairs in proton–proton collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector // Eur. Phys. J. C 80 (2020) 616.*

УДК 539.1

Разработка сервиса REST API и пользовательского интерфейса системы метаданных физических событий для экспериментов проекта NICA

А.Г. Дегтярев^{1,2}, К.В. Герценбергер³, П.А. Климай^{1,2}, А.В. Мацейко^{1,2}, А.Ю. Леонов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт ядерных исследований РАН

³Объединённый институт ядерных исследований

Мегапроект NICA [1] нацелен на лабораторное исследование ядерной материи в экстремальных условиях высочайших плотностей и температур, достигающихся в столкновениях тяжелых ионов. Теоретические модели предлагают различные возможные сценарии для описания сверхплотной сильно взаимодействующей материи, поэтому необходимы новые экспериментальные данные с высоким разрешением и статистикой, что даст возможность, в частности, изучить уравнение состояния ядерного вещества, наблюдать изменение свойств адронов в среде, а также, возможно, увидеть начало восстановления киральной симметрии.

Для автоматизации обработки, хранения и анализа подобных экспериментальных данных требуется создание ряда информационных систем физических экспериментов. Одной из них является система метаданных событий, обеспечивающая запись базовой информации (метаданных) о каждом зарегистрированном экспериментальном событии в специальный каталог событий, удобный и быстрый доступ к этим метаданным, онлайн- и офлайн-сервисы для отбора событий по интересующим параметрам, предоставление пользователю сводной информации по этим событиям, их идентификаторов или полной информации о событиях, а также запуск обработки выбранных событий через систему распределенного выполнения задач. При этом существенно, что метаданные, как правило, на 3–4 порядка

меньше по объему, чем полная информация о событиях, которая хранится отдельно. Подобные решения используются в большинстве крупных ускорительных экспериментов, включая ATLAS [2], CMS [3] и BESIII [4], но пока не существует единого универсального подхода к созданию систем метаданных, в связи с тем, что такие системы существенно зависят от конкретных условий и формата данных эксперимента.

Первой задачей, которая была решена при разработке системы метаданных событий для NICA, стала разработка каталога событий, в том числе выбор наиболее подходящей с точки зрения производительности и поддержки системы управления базами данных (СУБД). Для этого были протестированы различные SQL и NoSQL решения, такие как: СУБД PostgreSQL, Apache Cassandra и Hadoop HBase [5, 6]. В результате для реализации каталога событий взята система PostgreSQL. Помимо этого, к настоящему моменту создана база данных (БД) условий и режимов работы [7], хранящая общую информацию обо всех запусках в сеансах эксперимента (включая энергию пучка частиц, тип частицы, триггеры, магнитное поле). Подготовленные для физического анализа реконструированные события эксперимента хранятся в виде ROOT-файлов (формата DST) в хранилище с распределенной файловой системой. Эти и некоторые другие элементы системы метаданных событий NICA показаны на рис. 1.

Следующая задача, которой и посвящена данная работа, – разработка сервиса REST API и пользовательского веб-интерфейса для системы метаданных событий.

Веб-интерфейс необходим в первую очередь для предварительного просмотра пользователями (членами соответствующей коллаборации) и работы с каталогом событий. Предусмотрена возможность получить список метаданных, отобранных по заданным критериям событий в виде JSON-файла, либо сразу получить полную информацию о событиях в формате ROOT-дерева.

Сервис REST API используется для программного доступа и работы с каталогом событий. Чтение и запись осуществляются специальными HTTP-запросами, при этом используется JSON-форматирование для метаданных. Запись новых событий в каталог производится посредством макроса, обрабатывающего поступившие события эксперимента и вызывающего REST API-методы непосредственно из среды ROOT (в частности, из VmnRoot [8] для эксперимента VM@N – первого эксперимента проекта NICA).

Отбор событий как в веб-интерфейсе, так и в REST API осуществляется по произвольному набору параметров, при этом сами параметры (храняемые метаданные каждого события) изначально настраиваются через конфигурационный файл сервиса, что обеспечивает гибкую настройку под конкретный эксперимент. Сервисы интегрируются с БД условий, что позволяет делать выборку также по глобальным параметрам проводимых сеансов эксперимента.

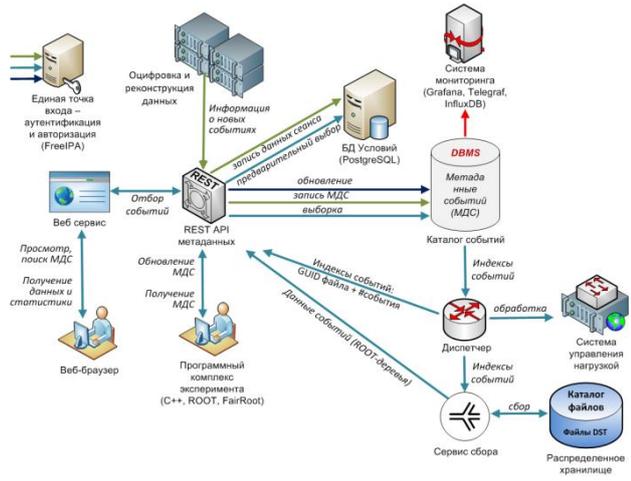


Рис. 1. Общая архитектура системы метаданных событий в экспериментах проекта NICA

Все запросы как к веб-интерфейсу, так и к REST API аутентифицируются через специализированную систему FreeIPA/LDAP. При этом реализован доступ на основе ролей: любой пользователь может просматривать каталог событий, но запись событий или их удаление (например, в случае ошибочной записи) требует задания специальной роли пользователя в системе.

К настоящему моменту развернута первая версия системы метаданных физических событий для уже идущего эксперимента $BM@N$, проведено заполнение каталога реальными событиями эксперимента, ведется работа по улучшению пользовательского интерфейса и дальнейшая интеграция с другими информационными системами эксперимента.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ в рамках научного проекта № 18-02-40125.

Литература

1. *Blaschke D., [et al.]*. NICA White paper. Searching for a QCD mixed phase at the Nuclotron-based ion collider facility. URL: http://mpd.jinr.ru/wp-content/uploads/2016/04/WhitePaper_10.01.pdf (дата обращения 15.10.2021).
2. *Barberis D., [et al.]*. The ATLAS EventIndex: Full chain deployment and first operation // Nucl. Part. Phys. Proc. 2016. V. 273–275. P. 913.
3. *Giffels M., [et al.]*. Data Bookkeeping Service 3 - Providing event metadata in CMS // J. Phys.: Conf. Ser. 2014. V. 513. P. 042022.
4. *Dai S., [et al.]*. Evaluating Index Systems of High Energy Physics // Communications in Computer and Information Science. 2019. V. 911. P. 15.
5. *Дегтярев А.Г., [и др.]*. Проектирование системы метаданных физических событий эксперимента $BM@N$ мегапроекта NICA // Труды 63-й Всероссийской научной конференции МФТИ. Фундаментальная и прикладная физика. М.: МФТИ, 2020. С. 56.
6. *Alexandrov E., [et al.]*. Design of the Event Metadata System for the Experiments at NICA // Phys. Part. Nuclei Lett. 2021. V. 18. P. 603.
7. *Герценбергер К. В., [и др.]*. Проектирование базы данных состояний для онлайн и офлайн обработки данных экспериментальных установок комплекса NICA // Известия ЮФУ. Технические науки. Ростов-на-Дону–Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2020, № 7 (217), С. 172.
8. *Batyuk P., [et al.]*. The BmnRoot framework for experimental data processing in the $BM@N$ experiment at NICA // EPJ Web of Conferences. 2019. V. 214. P. 05027.

УДК 53.01

Моделирование экспериментальной установки по исследованию Комптоновского рассеяния запутанных и декогерентных аннигиляционных фотонов

С.А. Мусин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Институт ядерных исследований РАН

Согласно теоретическим представлениям, в результате аннигиляции электрон-позитронной пары рождается два гамма-кванта в состоянии квантовой запутанности. Однако до настоящего времени нет экспериментальных данных, позволяющих прямым измерением точно подтвердить запутанность аннигиляционных фотонов в диапазоне энергий порядка 1 МэВ. В данной работе приводятся результаты Монте-Карло моделирования в GEANT4 установки для исследования запутанности аннигиляционных фотонов. Схема установки представлена на рис. 1.

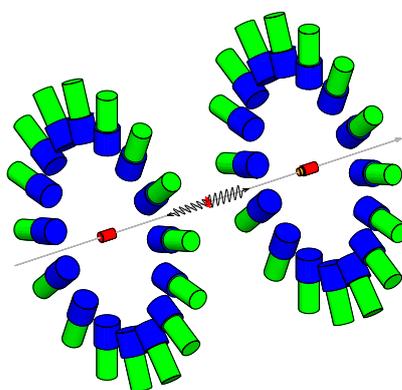


Рис. 1. Схема установки

Моделирование работы установки проводится для случаев запутанных, а также декогерентных фотонов. Для получения декогерентных фотонов в систему перед одним из основных Комптоновских рассеивателей вносится промежуточный рассеиватель.

В первом случае фотоны, рожденные в процессе аннигиляции, вылетают в противоположные стороны из коллиматора, одновременно взаимодействуя с Комптоновскими рассеивателями, равноудаленными от источника. Установка сконструирована таким образом, что сцинтилляторы NaI(Tl), расположенные вокруг каждого из рассеивателей, детектируют гамма-кванты, рассеявшиеся на угол $\pi/2$. Во втором случае один из гамма-квантов сначала рассеивается в промежуточном рассеивателе, что вызывает потерю состояния запутанности.

На рис. 2 представлены энергетические спектры в основном Комптоновском рассеивателе и NaI(Tl), полученные в результате моделирования для случая запутанных фотонов. Пик энерговыделения в основном рассеивателе приходится на 257 кэВ, что совпадает с теоретическими значениями для Комптоновского рассеяния на угол $\pi/2$. Уширение пика связано с конечным угловым размером NaI(Tl) детекторов и конечным геометрическим размером основного Комптоновского рассеивателя. Дополнительный пик в районе 130 кэВ в спектре NaI(Tl) появляется вследствие двойного Комптоновского рассеяния в основном рассеивателе.

Сечение Комптоновского рассеяния аннигиляционных фотонов с учетом поляризации просчитано в работе [1]:

$$dP = \frac{k_1^2 k_2^2 (\varepsilon_1 \varepsilon_2 - \varepsilon_1 \sin^2 \theta_2 - \varepsilon_2 \sin^2 \theta_1 + 2 \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2 \sin^2 \varphi)}{4\pi^2 k_0^2 \left(\frac{40}{9} - 3 \ln 3\right)^2} d\Omega_1 d\Omega_2 \quad (1)$$

$$\varepsilon_1 = \frac{k_1}{k_0} + \frac{k_0}{k_1} \quad \varepsilon_2 = \frac{k_2}{k_0} + \frac{k_0}{k_2}$$

Здесь k_0 – величина импульса исходных фотонов, $k_{1,2}$ – величины импульсов рассеянных фотонов. Обозначим отношение скорости счета двойных совпадений для фотонов, рассеянных под углами с разницей $\pi/2$, к скорости счета для гамма-квантов, рассеянных под одинаковыми углами:

$$R = \frac{N_{\pi/2}}{N_0} \quad (2)$$

Для запутанных гамма-квантов данное отношение должно принимать значение 2.6, а для декогерентных это значение должно быть меньше 2 [2].

Для моделирования Комптоновского рассеяния в GEANT4 был использован класс GEANT4 11.0(beta), написанный авторами [3]. На рис. 3 представлены графики зависимости количества двойных совпадений от разности азимутальных углов рассеяния для случаев запутанных и декогерентных фотонов, полученные в результате моделирования. Для случая запутанных фотонов отношение (2) принимает значение (2.42 ± 0.05) . В эксперименте это отношение принимает значение (2.56 ± 0.07) , что хорошо согласуется с Монте-Карло расчетами. Для случая декогерентных фотонов (2) принимает значение (1.44 ± 0.03) , в то время как в эксперименте (2.04 ± 0.15) . Разногласие между моделированием и экспериментом говорит о том, что GEANT4 неправильно рассчитывает сечение рассеяния запутанных фотонов при наличии более одного взаимодействия.

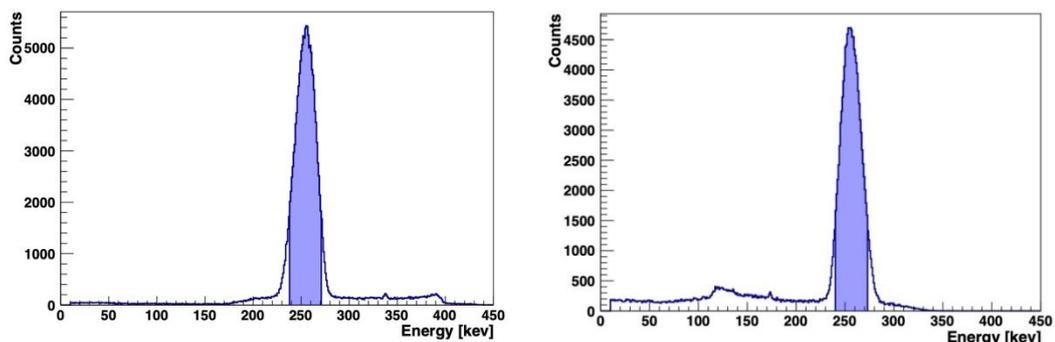


Рис. 2. Энергетические спектры в Комптоновском рассеивателе (слева) и NaI(Tl) детекторе (справа) для случая запутанных фотонов

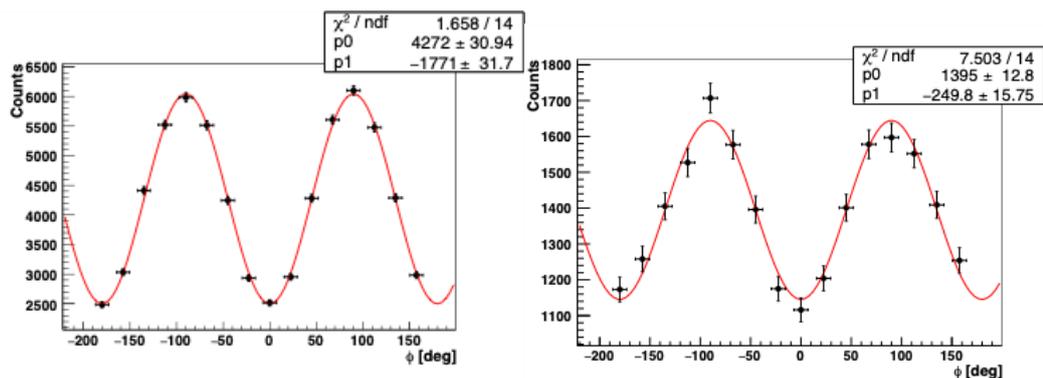


Рис. 3 Угловая зависимость числа отсчетов для запутанных фотонов (слева) и для некогерентных фотонов (справа)

Литература

1. Snyder [et al.]. Angular Correlation of Scattered Annihilation Radiation // Phys.ReV. 73 (1948) 440–448.
2. Bohm D., Aharonov Y. Discussion of Experimental Proof for the Paradox of Einstein, Rosen, and Podolsky // Phys. ReV. (1957) 108, 1070.
3. Watts [et al.]. Photon quantum entanglement in the MeV regime and its application in PET imaging // Nat Commun 12, 2646 (2021).

УДК 539.1.01

Дипольная поляризуемость дважды магических ядер

Н.Е. Солонович^{1,2}

¹Объединенный институт ядерных исследований

²Государственный университет «Дубна»

Изучение ядерных гигантских резонансов уже давно является предметом обширных теоретических и экспериментальных исследований. Экспериментальные данные о гигантских резонансах позволяют определить фундаментальные свойства, связанные с ядерным взаимодействием в ядерной среде [1, 2]. В частности, ожидается, что исследование гигантских дипольных резонансов (ГДР) предоставит информацию о члене энергии симметрии в уравнении состояния. Эта информация очень актуальна для моделирования нейтронных звезд. Область энергий, изучаемая в ГДР, также охватывает большую часть, относящуюся к определению ядерной электрической дипольной поляризуемости [3]. Поляризуемость является важной наблюдаемой величиной, поскольку ее можно измерить в конечных ядрах, и она дает важную информацию о толщине нейтронной «шубы».

Новые спектроскопические исследования ГДР в нейтронно-избыточных ядрах стимулируют развитие ядерных моделей. Одним из успешных инструментов для описания ГДР является приближение случайных фаз (ПСФ) с самосогласованным средним полем, полученным с использованием эффективного нуклон-нуклонного взаимодействия Скирма [4]. В данной работе рассмотрены распределения силы $E1$ переходов в ^{48}Ca , ^{68}Ni и ^{208}Pb . В этих ядрах вычислена ядерная электрическая дипольная поляризуемость. Проанализированы корреляции между электрической дипольной поляризуемостью и нейтронной «шубой». На основании полученных корреляций и имеющихся экспериментальных данных удается уточнить значение энергии симметрии [5].

Литература

1. Savran D., Aumann T., Zilges A. // Prog. Part. Nucl. Phys. 2013, V. 70. P. 210.
2. Bracco A., Lanza E., Tamii A. // Prog. Part. Nucl. Phys. 2019. V. 106. P. 360.
3. Bohigas O., Gai N.V., Vautherin D. // Phys. Lett. B. 1981. V. 102. P. 105.
4. Paar N., D. Vretenar, Khan E., Colò G. // ReP. Prog. Phys. 2007. V. 70. P. 691.
5. Solonovich N.E., Arsenyev N.N., Severyukhin A.P // in preparation.

Разработка метода обработки данных эксперимента Baikal-GVD [1, 2] с применением нейронных сетей

А.В. Мацейко^{1,2}, А.Ю. Леонов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт ядерных исследований РАН

Целью работы является создание нейронных сетей для решения задач обработки больших данных нейтринного телескопа Baikal-GVD. Целью эксперимента является исследование потока нейтрино высоких энергий в северном полушарии. Установка представляет собой набор фотоэлектронных умножителей (ФЭУ), улавливающих черенковское излучение [2] рождённых в реакциях с космическими лучами заряженных частиц. Детекторы расположены на струнах, опущенных в озеро Байкал на глубину порядка 1 км. Струны в свою очередь собраны в т.н. кластеры (см. рис. 1).

В данной работе не шумовыми событиями считаются детектирование каскадов заряженных частиц, вызванных нейтрино или атмосферными мюонами. В эксперименте стоят следующие задачи:

1) Разделение срабатывания детекторов на вызванные шумовыми явлениями и на сработавшие из-за мюонов или нейтрино.

2) Классификация событий на вызванные нейтрино высоких энергий и вызванные атмосферными мюонами.

3) Задача восстановления параметров задетектированного нейтрино: энергия и направление прилёта.

Сейчас они решаются стандартными алгоритмическими методами [1, 3, 4]. Цель этой работы состоит в создании нейронных сетей, которые бы справлялись с этими задачами лучше. В работе используются Монте-Карло моделирование отклика детекторов в одном кластере после пролёта мюонов или нейтрино с учётом шумового фона. На их основе и тренируются нейронные сети.

Параллельно разрабатываются 2 подхода построения нейронных сетей. В первом данные представляются как трёхмерная картинка, каждый «пиксель» которой отображает детектор с хранящейся внутри информацией о сигнале. Для обработки таких данных используется свёрточная нейросеть (CNN). Во втором подходе срабатывания детекторов упорядочиваются по времени и собираются в массив, к которому после применяются одномерные свёрточные нейросети типа U-Net [5] или Res-Net [6].

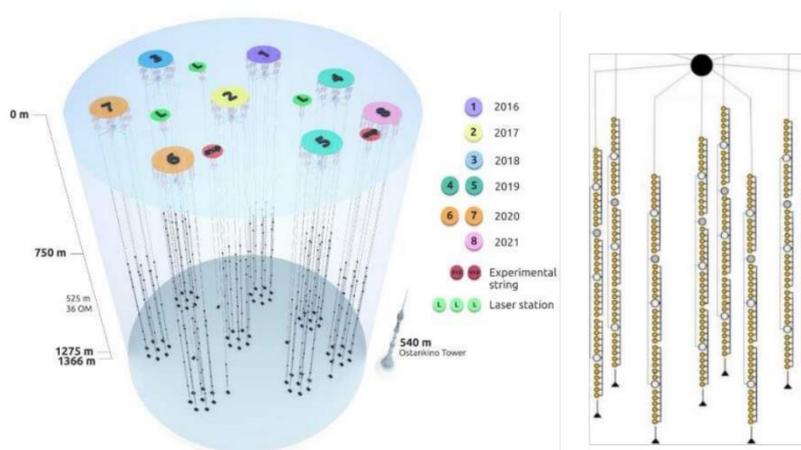


Рис. 1. Слева: схематический вид детектора Baikal-GVD. Годовой прогресс развертывания детектора показан в легенде. Справа: схема кластера Baikal-GVD (сжатый по вертикали)

На данный момент частично решены задачи 1) и 2): для обоих подходов степень очистки срабатываний детекторов от шума составляет около 98%, а доля верно классифицированных событий – 96%. В среднем, подход с упорядочиванием срабатываний по времени даёт лучшие результаты.

В дальнейшем планируется использовать нейросеть, решающую задачу 1) для «очистки» данных от шума, что улучшит точность нейросетей для задач 2) и 3).

Литература

1. *Belolaptikov I. [et al.]*. Neutrino Telescope in Lake Baikal: Present and Nearest Future // 37th International Cosmic Ray Conference (ICRC 2021) July 12th–23rd, 2021 Online – Berlin, Germany.
2. *Dzhilkibaev Zh.-A.M., Domogatsky G.V., Suvorova O.V.*, Cherenkov detectors for high-energy neutrino astrophysics. *Physics-Uspekhi*, 58(5), 495–502 (2015).
3. *Allakhverdyan V. A. [et al.]*. Measuring muon tracks in Baikal-GVD using a fast reconstruction algorithm, submitted to *Eur. Phys. J. C*. [arXiv:2106.06288]
4. *Allakhverdyan V. A. et al.* Observations of track-like neutrino events with Baikal-GVD. Published in: PoS ICRC2021 (2021) 1177 Contribution to: ICRC 2021 e-Print: 2108.04704 [astro-ph.HE].
5. *Ronneberger O., Fischer P., homas Brox T.*, U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation. [arXiv:1505.04597]
6. *He K., Zhang X., Ren S., Sun J.*, Deep Residual Learning for Image Recognition. [arXiv:1512.03385]

УДК 52-17

Направленное наблюдение частиц Тёмной материи в детекторе с жидким и газообразным аргонем

И.Д. Видулин^{1,2}, Гуляева В.В.¹, А.М. Анохина^{1,2}

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет

² Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына

На данный момент имеются убедительные доказательства существования во Вселенной тёмной материи, такие как кривые вращения галактик, эффекты гравитационного линзирования и столкновения кластеров галактик, количественные оценки плотностей барионного и небарионного вещества, полученные из анализа нуклеосинтеза Большого взрыва. Создано множество расширений Стандартной Модели, которые рассматривают различные кандидаты в частицы тёмной материи. Эксперименты нового поколения призваны зарегистрировать эти частицы. При этом направленные исследования имеют существенное преимущество, так как детекторы, способные отследить направление прилета частицы, позволяют не просто регистрировать сам сигнал, но и судить о его источнике, что даёт возможность лучше проверять согласие с теоретическими моделями.

Особый интерес имеют эксперименты, имеющие в качестве детектирующего вещества относительно лёгкие ядра, так как кинематически они эффективнее обмениваются импульсом с легкими кандидатами в частицы тёмной материи, в то время как на тяжёлые кандидаты уже получены более строгие ограничения различными экспериментами, такими как XENON1T [1]. Поэтому на взаимодействие с WIMP (Weakly Interacting Massive Particle – слабо взаимодействующая массивная частица – кандидат в частицы тёмной материи) были рассмотрены ядра H, C, N, O, F, которые входят в состав ядерной эмульсии (H, C, N, O, Ag, Br), пропана C₃H₈ и октафторпропана C₃F₈. Было смоделировано упругое рассеяние WIMP на данных ядрах, получены треки ядер отдачи с помощью программного комплекса GEANT4 [2] (StandardNR Physics List), построены распределения длин треков и угловые распределения. А также были получены количественные оценки на сечение WIMP-ядерного взаимодействия в комплексе MicrOMEGAs [3] для нескольких моделей – расширений Стандартной Модели (MSSM – Minimal Supersymmetric Model, NMSSM – Next to Minimal Supersymmetric Model, IDM – Inert Doublet Model). Оценены потенциальные количества событий от WIMP в сравнении с одной из основных компонент фона – солнечных нейтрино. Со всеми графиками и выкладками можно ознакомиться в работе [4].

Предполагается отработанную схему моделирования и анализа сигнала от упругого взаимодействия WIMP применить для чувствительного вещества детектора в виде жидкого и газообразного аргона. Уже получены распределения аргонных ядер отдачи по энергии и углу для различных масс WIMP (рис. 1). Также планируется учесть возможный сигнал от электронов Мигдала, появляющихся при взаимодействии WIMP с атомом. Данный сигнал может быть достаточно существенным [5]. Эффект Мигдала заключается в следующем: при упругом взаимодействии налетающая частица «толкает» ядро мишени, атомная оболочка вынуждена перестраиваться и тоже приходит в движение вслед за ядром, в результате, один из электронов может отстать и покинуть атом. рис. 2 иллюстрирует энергетическое и угловое распределение электронов Мигдала. Отдельного рассмотрения требует вклад торсионного излучения электронов атомной оболочки аргона [6].

В качестве существующего и успешно функционирующего детектора планируется рассмотреть двухфазную времяпроекционную камеру эксперимента DarkSide [7]. Камера окружена сложной системой защиты от фонов, расположена глубоко под землёй в лаборатории Гран-Сассо (Италия) и наполнена аргоном, который находится в жидком и газообразном состояниях. Сигнал о взаимодействии частицы с веществом детектора фиксируется сцинтилляторами, расположенными вокруг камеры. В результате определяется время попадания частицы и её энергия.

Настоящая работа поддержана Междисциплинарной научно-образовательной школой Московского университета «Фундаментальные и прикладные исследования космоса».

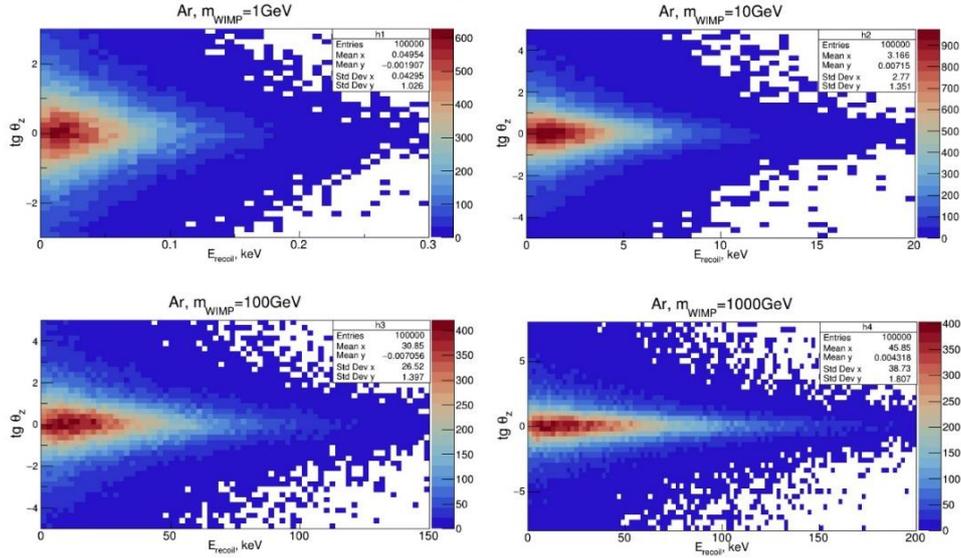


Рис. 1. Распределение ядер отдачи по энергии и углу между направлением ядра отдачи и налетающим WIMP (с массой 1, 10, 100, 1000 ГэВ) в проекции на плоскость YOZ, если максимум потока WIMP направлен по оси Z

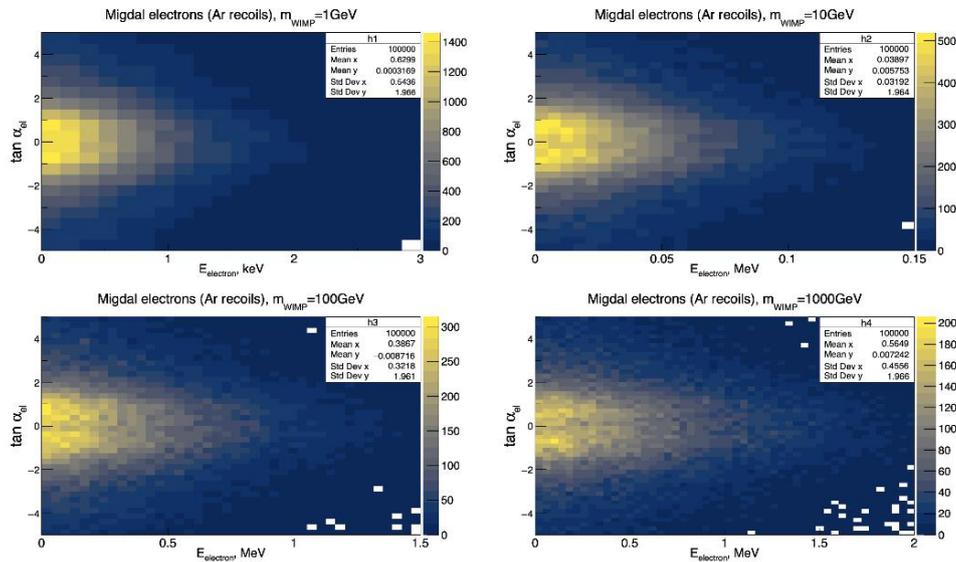


Рис. 2. Распределение электронов Мигдала по энергии и углу между направлением электрона и налетающим WIMP (с массой 1, 10, 100, 1000 ГэВ) в проекции на плоскость YOZ, если максимум потока WIMP направлен по оси Z

Литература

1. *Aprile E. [et al.]*. First dark matter search results from the XENON1T experiment. *Phys. ReV. Lett.* 2017.
2. *Geant4 Collaboration*. Book for Application Developers. 2017.
3. *Pukhov A., Belanger G., Boudjema F.* MicrOMEGAs : a code for the calculation of Dark Matter properties in generic models of particle interaction // arXiv:1402.0787 [hep-ph]. 2014.
4. *Anokhina A. [et al.]*. Directional Observation of Cold Dark Matter Particles (WIMP) in Light Target Experiments // *Universe*. 2021. V. 7, № 7. P. 215.
5. *Dolan M.J., Kahlhoefer F., McCabe C.* Directly Detecting Sub-GeV Dark Matter with Electrons from Nuclear Scattering // *Phys. ReV. Lett.* American Physical Society, 2018. V. 121, № 10.

6. *Di Cortona G.G., Messina A., Piacentini S.* Migdal effect and photon Bremsstrahlung: improving the sensitivity to light dark matter of liquid argon experiments // *J. High Energ. Phys.* 2020. V. 2020, № 11. P. 34.
7. *Fan A.* Results from the DarkSide-50 Dark Matter Experiment // UCLA, 2016.

УДК 539.126.6.

Применение машинного обучения для анализа данных о Σ^0 гипероне

С.А. Солохин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В работе рассмотрено применение основных методов машинного обучения на размеченных данных (обучения с учителем) в физике высоких энергий на примере анализа данных о Σ^0 гипероне [1, 2] в столкновениях пучков ядер свинца в эксперименте ALICE на Большом адронном коллайдере [2] с помощью метода расширяемых деревьев решений. Исследовано влияние алгоритма на такие параметры, как число сигнальных частиц (то есть образованных при распаде Σ^0 гиперона), реконструированных в наборе данных, и значимость сигнала, то есть отношение общего числа сигнальных частиц к корню из суммы числа сигнальных и фоновых частиц, попавших в диапазон массы вышеназванного гиперона. Показана эффективность применения данного метода для анализа данных в физике высоких энергий [3, 4].

Обозначены перспективы развития работы, а также области её возможного приложения: исследование кварк-глюонной плазмы в столкновениях встречных пучков тяжёлых ядер (таких, как свинец) для поиска гипетрития [5] (то есть трития, в ядре которого один из нейтронов замещён на Λ^0 гиперон). Результаты таких исследований могли бы быть интересны для изучения нейтронных звёзд, так как наличие нейтральных гиперонов внутри них могло бы объяснить различие рассчитанной и измеренной масс данного типа звёзд.

Литература

1. *Ишханов Б.С., Капитонов И.М., Юдин Н.П.* Частицы и атомные ядра. М.: ЛЕНАНД, 2019–672 с.
2. *Семичев А.В.* Изучение образования Σ^0 -гиперона в столкновениях ядер свинца при энергии $\sqrt{s} = 5.02$ ТэВ в эксперименте ALICE на LHC. Магистерский диплом, НИЯУ МИФИ, 2019.
3. *Гущин Д.С.* Применение машинного обучения в задачах обработки и хранения данных в экспериментах физики высоких энергий. Диссертация на соискание учёной степени к.ф.-м.н.МФТИ, 2019.
4. *Schaapherder T.* Photon Conversion Classification by Boosting Decision Trees. Bachelor Thesis, Universiteit Utrecht, 2018.
5. *Z. Citron [et al.].* Future Physics opportunities for high-density QCD at the LHC with heavy-ion and proton beams, arXiv: 1812.06772; CERN-LPCC-2018-07.

УДК 539.12

Поиск тяжелых нейтральных лептонов при различных фоновых событиях в эксперименте SHiP

Э.Д. Урсов^{1,2}, А.М. Анохина^{1,2}

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Физический факультет

²НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына

В настоящее время Стандартная Модель (СМ) физики частиц и взаимодействий хорошо согласуется с результатами большинства экспериментов в физике высоких энергий. Однако со временем стали накапливаться экспериментальные данные, которые СМ описать не в состоянии (космологические свидетельства существования темной материи, осцилляции нейтрино, барионная асимметрия Вселенной) [1]. В связи с этим активно разрабатываются модели скрытого сектора (вне СМ), в которых вводятся новые слабовзаимодействующие частицы и описываются их взаимодействия между собой и частицами СМ.

Основной целью разрабатываемого в настоящее время эксперимента SHiP (Search For Hidden Particles) [2] на кольце SPS (энергия налетающего пучка протонов 400 ГэВ) в CERN является поиск частиц скрытого сектора. Для этого в SHiP будет реализована детекторная система для регистрации

возможных продуктов распада частиц скрытого сектора. Предполагается, что частицы скрытого сектора будут распадаться на частицы СМ в вакуумном распадном объеме в форме усеченной пирамиды длиной около 50 м, а продукты распада будут регистрироваться трековыми детекторами.

Целью данной работы является проведение оптимизации геометрии эксперимента SHiP для увеличения потенциального сигнала от частиц скрытого сектора и поиск критериев отбора событий на фоне событий от мюонов и нейтрино. В качестве модели скрытого сектора была выбрана Нейтринная Минимальная СМ [3], в которой вводятся три тяжелых нейтральных лептона (Heavy Neutral Leptons – HNL), кинетически смешанных с нейтрино СМ. В качестве Монте-Карло симулятора событий в SHiP используется программный комплекс FairShip, основанный на комплексах Geant4 [5] и Pythia8 [6], который содержит в себе все элементы экспериментальной установки.

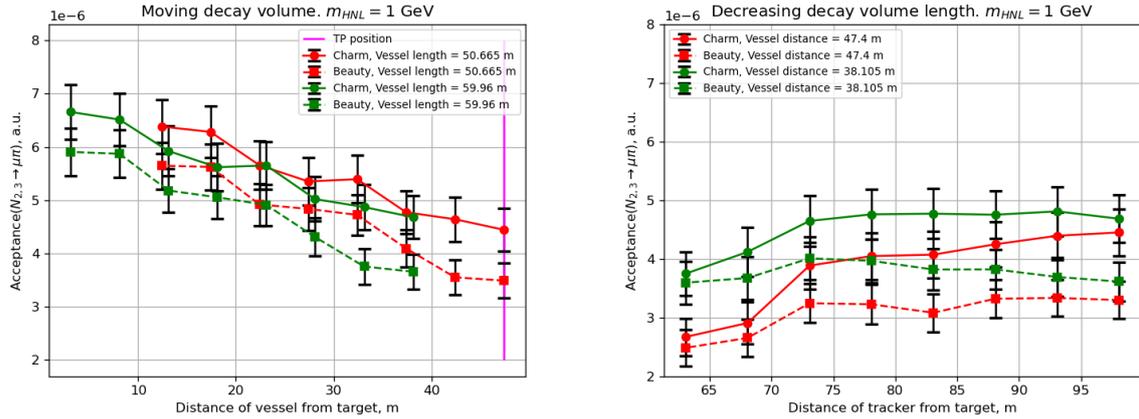


Рис. 1. Зависимость геометрического фактора от геометрии распадного объема. На графике слева распадный объем перемещался ближе к мишени, на правом рисунке длина распадного объема уменьшалась, при этом сам он не двигался. Указаны два варианта распадного объема: длинная версия (59.96 м) и стандартная (50.665 м), а также два канала рождения HNL: рождение в результате распада В-мезонов и D-мезонов. Вертикальная фиолетовая линия показывает расстояние распадного объема до мишени в изначальном проекте SHiP

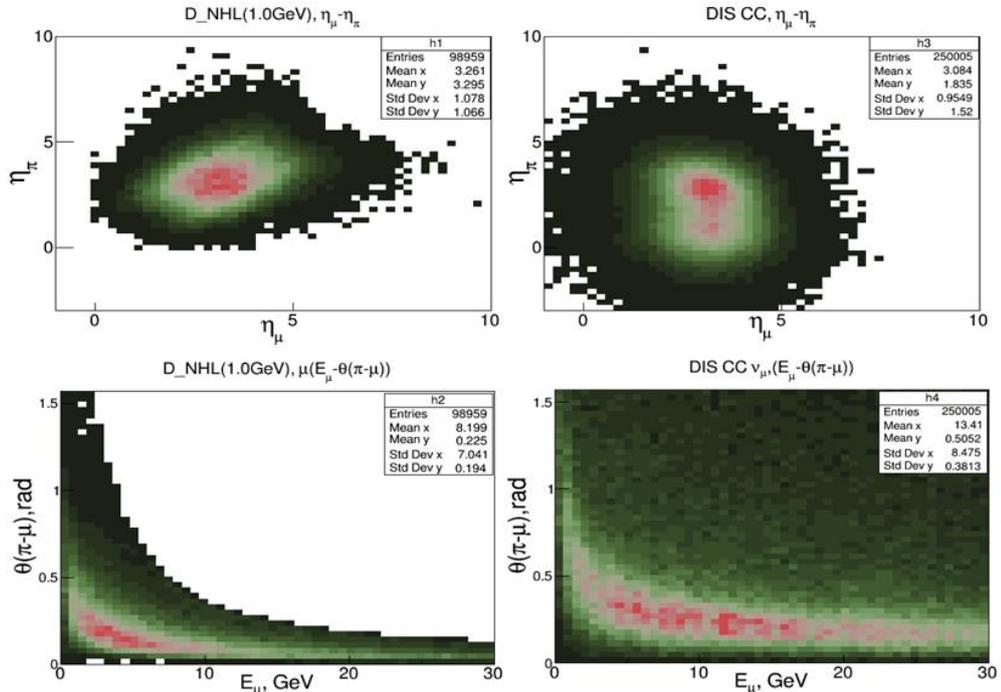


Рис. 2. Сверху: распределение псевдобыстрот вторичных частиц (мюонов и пионов) в событиях HNL и нейтрино, снизу: распределение энергии мюонов и относительной угол между мюоном и пионом в событиях HNL и нейтрино

В работе проведено моделирование событий HNL для различных каналов рождения (при распаде В- или D-мезона) и каналов распада, а также при различном выборе параметров самих HNL (масса, коэффициент смешивания). Моделирование производилось при различной геометрии распадного объ-

ема. Исследована зависимость геометрического фактора детектора от расположения и размеров распадного объема (рис. 1). Сделаны следующие выводы, необходимые для подготовки соответствующего помещения и монтажа установки: 1) при перемещении распадного объема ближе к мишени геометрический фактор существенно увеличился; 2) при уменьшении длины распадного объема на 25 м геометрический фактор уменьшился не больше, чем на 5%. Эти данные говорят о том, что длину экспериментальной установки SHiP можно существенно уменьшить, не потеряв при этом физическую эффективность (без учета фона).

В качестве фоновых событий были смоделированы события, связанные с рождением нейтрино в мишени SHiP и глубоконеупругим рассеянием нейтрино в пассивном веществе детекторов. Кинематические параметры вторичных частиц (мюонов и пионов) от рассеяния нейтрино и распада HNL были использованы для создания классификатора для отбора событий HNL на фоне нейтринных (рис. 2).

Настоящая работа поддержана Междисциплинарной научно-образовательной школой Московского университета «Фундаментальные и прикладные исследования космоса».

Литература

1. Lantwin, O. (2019). Optimisation of the SHiP experimental design. <https://cds.cern.ch/record/2693177>
2. SHiP Collaboration. A facility to Search for Hidden Particles (SHiP) at the CERN SPS. 2015.
3. Asaka, T., Blanchet, S., & Shaposhnikov, M. (2005). The ν MSM, dark matter and neutrino masses. *Physics Letters B*, 631(4), 151–156. <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2005.09.070>
4. Andreopoulos C. [et al.]. The GENIE Neutrino Monte Carlo Generator: Physics and User Manual. 2015.
5. Geant4 Collaboration, Geant4. 2017. Book For Application Developers.
6. Sjöstrand, T. PYTHIA 6.4 physics and manual // *J. High Energy Phys.* 2006. V. 2006. P. 26.

УДК 539.1.07

О возможности исследования образования чармония в эксперименте ALICE3 на Большом адронном коллайдере

А.М. Варламов¹, Ю.В. Харлов^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² НИЦ «Курчатовский Институт» – ИФВЭ

Экспериментальные исследования свойств сильновзаимодействующей материи на коллайдерах протонов и тяжелых ионов проводятся на протяжении последних двух десятилетий по нескольким направлениям, охватывающим измерения выходов, корреляций и коллективных эффектов частиц конечного состояния. В силу сложности постановки экспериментов на коллайдерах тяжелых ионов, высокого уровня фона и низкой светимости ионных пучков все ключевые измерения до сих пор были проведены на основе регистрации адронов, состоящих их кварков легких ароматов u, d, s . Исследования кварк-глюонной материей с помощью тяжелых кварков c, b или проведены с недостаточной статистической точностью, или вообще не были возможны в силу малых сечений, недостаточной светимостью ионных коллайдеров и несовершенством детектирующей аппаратуры.

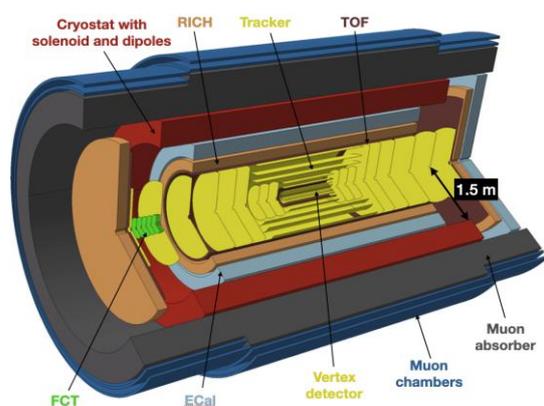


Рис. 1: Экспериментальная установка ALICE3 на коллайдере HL-LHC

В настоящей работе рассмотрены методы измерения спектров образования состояний чармония $\chi_{cJ, J=0,1,2}$ в столкновениях протонов при энергии $\sqrt{s} = 13$ ТэВ в готовящемся эксперименте ALICE3 на Большом адронном коллайдере высокой светимости (HL-LHC) [1]. Экспериментальная установка ALICE3 изображена на рис. 1. Для регистрации продуктов распада $\chi_c \rightarrow J/\psi + \gamma \rightarrow e^+ + e^- \gamma$ в состав ALICE3 входит трековая система и электромагнитный калориметр, охватывающие точку пересечения пучков по полному азимутальному углу $\Delta\phi = 2\pi$ и 4 единицы по псевдобыстроте $|\eta| < 2$. Заряженные треки e^\pm реконструируются в трековой системе в магнитном поле соленоида с напряженностью поля 2 Тл и разрешением по импульсу $p \sigma_p/p = 0.015$. Фотоны регистрируются

в электромагнитном калориметре, разрешение по энергии E которого параметризуется формулой $\sigma_E/E = \sqrt{a^2/E^2 + b^2/E + c^2}$, где параметры $a = 0.01$ ГэВ, $b = 0.02$ ГэВ^{1/2}, $c = 0.01$. Задачей данной работы являются разработка методов реконструкции χ_{cJ} , выбор необходимого энергетического разрешения электромагнитного калориметра и определение уровня фона.

Работа проводилась моделированием методом Монте-Карло с применением генератора событий Pythia 8.210, сконфигурированного для моделирования фоновых событий, описывающих неупругие взаимодействия протонов. Поскольку распад χ_{cJ} является двухступенчатым – вначале происходит распад $\chi_{cJ} \rightarrow J/\psi + \gamma$, а затем $J/\psi \rightarrow e^+e^-$, то первой задачей реконструкции является отбор кандидатов в J/ψ из всех электрон-позитронных пар события, удовлетворяющие гипотезе массы J/ψ , т. е. массы e^+e^- должны иметь инвариантную массу, отличающуюся от реконструированной средней массы J/ψ не более чем на одно стандартное отклонение. При этом эффективность отбора истинных J/ψ составляет 60–70% в зависимости от p_T , и в массив кандидатов в J/ψ могут попадать и фоновые события, т. е. электроны и позитроны от различных источников, инвариантная масса которых случайно совпадает с гипотезой массы J/ψ . На втором этапе реконструкции χ_{cJ} происходит комбинаторный перебор найденных кандидатов в J/ψ и всех фотонов в событии. Реконструкция χ_{cJ} основана на спектре разности инвариантных масс $\delta M = M(J/\psi\gamma) - M(J/\psi)$, к которой, как было показано в предыдущей работе [3], частично сокращаются неопределенности, вызванные конечным импульсным разрешением заряженных треков. Описанная реконструкция применялась как к сигнальным, так и к фоновым событиям. Поскольку сигнальные события в силу выбранной конфигурации генератора Pythia искусственно обогащены состояниями чармония, то комбинаторный фон под пиками χ_{cJ} на спектрах разности инвариантных масс δM оказывается несущественным. В фоновых событиях уровень комбинаторного фона зависит от поперечного импульса χ_{cJ} . Рисунок 2 иллюстрирует метод реконструкции χ_{cJ} , где показаны спектры разности инвариантных масс δM в событиях неупругих pp -взаимодействий при интегральной светимости 100нб^{-1} в двух диапазонах поперечных импульсов: $1 < p_T < 2$ ГэВ/с и $10 < p_T < 16$ ГэВ/с. При малых p_T пики, соответствующие состояниям χ_{c1} и χ_{c2} , слабо видны над комбинаторным фоном, но все же могут быть измерены при условии набора достаточной статистики. При высоких p_T состояния χ_{c1} и χ_{c2} имеют большую статистическую значимость и высокое соотношение сигнала к фону. Сигнал χ_{c0} практически неизмерим ввиду малого брэнчинга распада.

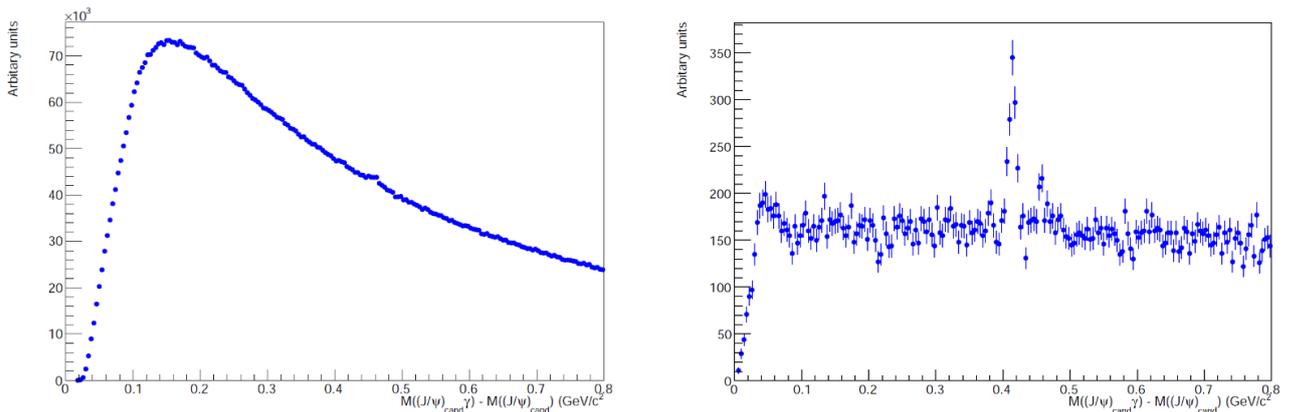


Рис. 2. Спектры разности инвариантных масс $\delta M = M(J/\psi\gamma) - M(J/\psi)$ в событиях неупругих pp -взаимодействий при $1 < p_T < 2$ ГэВ/с (слева) и $10 < p_T < 16$ ГэВ/с (справа)

В результате проведенного моделирования можно утверждать, что измерение сечений образования χ_{c1} и χ_{c2} в pp -столкновениях в будущем эксперименте ALICE возможно как с точки зрения массового разрешения данных состояний чармония, так и с точки зрения выделения сигнала над фоном.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 22-42-04405.

Литература

1. D. Adamová et al, A next-generation LHC heavy-ion experiment. arXiv:1902.01211 [physics.ins-det]
2. T. Sjöstrand, S. Ask, J.R. Christiansen, R. Corke, N. Desai, P. Ilten, S. Mrenna, S. Prestel, C.O. Rasmussen and P. Z. Skands, «An introduction to PYTHIA 8.2», Comput. Phys. Commun. 191 (2015), 159-177, doi: 10.1016/j.cpc.2015.01.024, [arXiv:1410.3012 [hep-ph]].
3. А.М. Варламов, Ю.В. Харлов. Образование состояний чармония χ_{cJ} ($J = 0, 1, 2$) в столкновениях протонов и тяжелых ионов на БАК. Труды 63-й Всероссийской научной конференции МФТИ (23–29 ноября 2020 года), секция Фундаментальная и прикладная физика (ISBN 978-5-7417-0754-8).

УДК 539.1.05

Реконструкция треков заряженных частиц в прототипе нейтринного детектора SuperFGD в магнитном поле

А.Е. Дергачева¹, А.Н. Хотянецв²

Институт ядерных исследований РАН (ИЯИ РАН)

T2K – эксперимент с длинной базой второго поколения, получивший первое указание на CP-нарушение в нейтринных осцилляциях. В 2016 году коллаборация T2K запустила проект модернизации ближнего детектора ND280 [1]. Основные задачи проекта – детектирование частиц от нейтринных взаимодействий в полном телесном угле и уменьшение в T2K систематической ошибки осцилляционного анализа до уровня $\leq 4\%$ [2]. Программа модернизации включает в себя разработку и создание нового высокосегментированного полностью активного сцинтилляционного 3D-детектора нейтрино – SuperFGD (рис. 1). Детектор, окончательно собранный на лесках в январе 2021 года в ИЯИ РАН, состоит из \sim двух миллионов оптически независимых $1 \times 1 \times 1 \text{ см}^3$ кубиков из экструдированного полистирола со сцинтилляционными добавками, считывание сигнала с которых будет производиться вдоль трех ортогональных направлений спектросмещающими (WLS) волокнами.

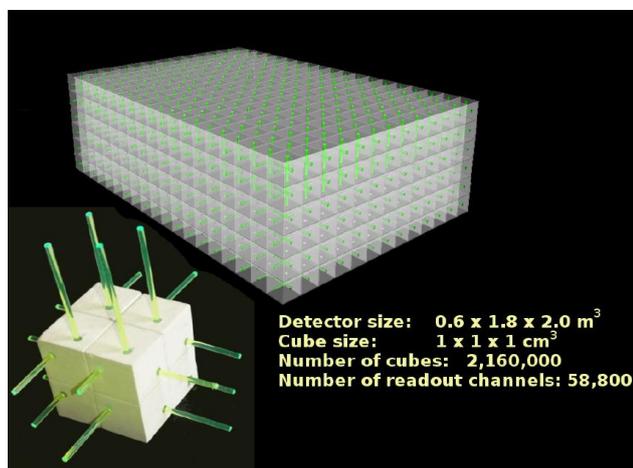


Рис. 1. Схематичный вид нейтринного детектора SuperFGD. Матрица $2 \times 2 \times 2$ сцинтилляционных кубика иллюстрирует 3D-считывание спектросмещающими волокнами

Положительные результаты теста «первого прототипа» нейтринного детектора SuperFGD (матрица $5 \times 5 \times 5$ кубиков) на пучке заряженных частиц в CERN послужили мотивацией для создания следующего прототипа нейтринного детектора сравнительно больших размеров – матрица $24 \times 8 \times 48$ (x-y-z оси, соответственно), состоящего из 9216 кубиков (рис. 2).

Сцинтилляционные кубики для прототипа SuperFGD размером $1 \times 1 \times 1 \text{ см}^3$ были изготовлены в ООО Унипласт (Владимир, Россия) из длинных экструдированных плит толщиной 10 мм. Толщина отражающего слоя на каждой поверхности кубика, протравленной в химическом веществе, составила 50–80 мкм. В каждом кубике были просверлены три ортогональных сквозных отверстия диаметром 1.5 мм для размещения спектросмещающих волокон ($\varnothing 1 \text{ мм}$). Один из концов волокна просматривался

фотосенсором, другой покрывался светоотражающей краской на основе алюминия. Всего в тесте прототипа были задействованы 1728 спектросмещающих волокон, которые считывались MPPCs трех типов.



Рис. 2. Слева: прототип SuperFGD, собранный на лесках, перед заменой их на спектросмещающие волокна. Справа: частично собранный SuperFGD- прототип, повернутый на 90 градусов вокруг z-оси

Тест SFGD-прототипа проводился с использованием электроники, разработанной для детектора Baby-MIND эксперимента WAGASCI.

Выполнен анализ результатов теста прототипа нейтринного детектора SuperFGD на пучке заряженных частиц в CERN. Полученные результаты будут представлены в докладе.

Литература

1. *Mineev O. et al.* Beam test results of 3D fine-grained scintillator detector prototype for T2K ND280 neutrino active target // Nucl. Instrum. Meth. A 923 (2019) 134-138 [physics.ins-det/1808.08829]
2. *Abe K. et al.* T2K ND280 Upgrade - Technical Design Report // CERN-SPSC-2019-001 [physics.ins-det/1901.03750]

УДК 539.123, 539.125, 359.16

Астрофизические исследования на детекторе большого объема LVD (Италия, Гран Сассо)

Н.Ю. Агафонова¹, Н. А. Филимонова^{1,2}

¹Институт ядерных исследований РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Экспериментальная установка LVD способна регистрировать нейтрино от коллапсов Звездных ядер в нашей Галактике. Основная реакция взаимодействия – обратный бета распад. Установлен более сильный предел на частоту вспышек за период наблюдения с 1992 по 2021 на 90% уровне достоверности. Фоном детектора являются атмосферные мюоны и естественная радиоактивность под землей.

Детектор Большого Объема – LVD (Large Volume Detector) находится в подземной лаборатории Гран Сассо (LNGS, Италия) на глубине 3650 м в.э. Проект LVD был разработан совместно сотрудниками Института ядерных исследований РАН и Института космогеофизики Италии.

Анализ первых данных со сцинтилляционных счетчиков LVD в Гран Сассо начался в 1992 году. В 2000 году было закончено строительство третьей башни. Полный размер детектора, состоящего из 840 счетчиков (1010 тонн сцинтиллятора – C_nH_{2n} , $n \sim 10$), составляет 11 м × 13.2 м × 22.7 м. Установка включает также железные конструкции с общей массой 1000 тонн и трековую систему, работавшую до 2002 года.

Главная задача LVD – регистрация нейтринных вспышек от коллапсирующих звезд. Основная реакция взаимодействия нейтрино в детекторе – это IBD-реакция (обратный бета распад $\bar{\nu}_e p \rightarrow n e^+$). Преимущество LVD перед большими водяными детекторами заключается в наличии углерода в сцинтилляторе и железа, что позволяет разделять разные типы нейтрино. Детектор способен зарегистрировать как электронные антинейтрино, так и мюонные и тау-нейтрино, и антинейтрино (реакция на угледе и железе).

Основой поиска нейтринных всплесков является идентификация кластеров событий с низкой вероятностью имитации событий за счет флуктуации фона. В течение 29 лет поиска таких кластеров на LVD, т.е. наблюдений гравитационных коллапсов, в том числе скрытых (без сброса оболочки), в Галактике и Магеллановых Облаках не обнаружено. По данным работы нейтринного телескопа LVD за 29 лет работы (1992–2021) получено экспериментальное ограничение на частоту нейтринных всплесков от гравитационных коллапсов звёзд в Галактике: менее 1 события за 12.6 г. на 90% уровне достоверности.

Фоном детектора LVD являются атмосферные мюоны и естественная радиоактивность под землей.

Атмосферные мюоны в детекторе достаточно легко идентифицировать, так как мюоны, проходя через вещество детектора, «зажигают» много счетчиков (от 2 до 50). Среднее энерговыделение в одном счетчике около 180 МэВ.

Еще одной интересной задачей, решаемой на LVD, является исследование низкоэнергетического фона ($E > 0.5$ МэВ) под землей. Изменения этого фона важны для экспериментов по поиску редких событий, например, темной материи и безнейтринного бета-распада.

Ведется постоянный контроль низкоэнергетического фона LVD с целью изучения вариаций концентрации радона, выходящего в атмосферу подземного помещения из горных пород перед землетрясениями. Радон образуется в грунте в результате деления и распадов элементов урановых и ториевого рядов и выходит в атмосферу подземного помещения через множественные микротрещины в породе или из воды, насыщающейся радоном (радон хорошо растворяется в воде) на пути через скальную породу до подземного зала. Поскольку количество микротрещин увеличивается при деформациях земной коры перед землетрясениями, то усиливается и испускание радона.

Установка LVD регистрирует гамма-кванты от распадов дочерних ядер радона, период полураспада которого 3.8 дня.

Гамма-излучение создается в основном ядрами висмута, за счёт бета-распада превращающихся в полоний с характерным временем 19.7 мин. Энергетический спектр гамма-излучения охватывает диапазон от 0.6 до 2.5 МэВ.

В поведении фона были найдены составляющие сезонной вариации (фаза которой приходится на начало сентября), недельные и дневные вариации. Установка LVD может наблюдать выбросы радона, связанные с сейсмической активностью в регионе. Эти исследования могут помочь геофизикам, быть еще одним инструментом, для успехов в предсказании разрушительных землетрясений.

Исследования на установке LVD охватывают широкий круг проблем подземной физики в области астрофизики и физики космических лучей.

Литература

1. Агафонова Н.Ю., Ашихмин В.В., Добрынина Е.А., Еникеев Р.И., Мальгин А.С., Ряжская О.Г., Шакирьянова И.Р., Якушев В.Ф. (от имени Коллаборации LVD), Яд. Физ. 81, № 1, 85 (2018) [Phys. Atom. Nucl. 81, 95 (2018)].

УДК 539.126.6

Обнаружение нового возбужденного $\Xi_b(6100)^-$ бариона в распаде на $\Xi_b^- \pi^+ \pi^-$ в эксперименте CMS

К.М. Иванов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Ξ_b барионы представляют из себя изодублеты, состоящие из qsb кварков, где легкий кварк первого поколения q является u (up) для Ξ_b^0 или d (down) для Ξ_b^- состояний соответственно. Согласно кварковой модели, должно существовать три изодублета, которые не являются ни радиальными, ни орбитальными возбуждениями – основные состояния Ξ_b с угловым моментом легкого дикварка $j_{qS} = 0$ и спин-четностью $J^P = 1/2^+$, спиновые возбуждения Ξ_b' с $j_{qS} = 1$ и $J^P = 1/2^+$ и Ξ_b^* с $j_{qS} = 1$ и $J^P = 3/2^+$. В соответствии с аналогией с хорошо изученными возбуждениями Ξ_c барионов [1], должны существовать орбитально возбужденные P -волновые изодублеты Ξ_b^{**} с $J^P = 1/2^-(3/2^-)$ и $L = 1$

между b кварком и qs дикварком, распадающиеся на $\Xi'_b(\Xi_b^*)\pi$. Схема этих изодублетов приведена на рис. 1.

Три состояния с $j_{qs} = 1$ были ранее обнаружены на БАКе коллаборациями CMS [2] и LHCb [3, 4] в распадах на $\Xi_b^-\pi^+$ или $\Xi_b^0\pi^-$, в то время как четвертое, Ξ_b^{*0} , не обнаружено в сильном распаде, т.к. его масса ожидается быть легче порога $\Xi_b\pi$. Недавно коллаборация LHCb объявила также об обнаружении $\Xi_b(6227)$ изодублета [5,6] и возбуждений $\Xi_b(6327)^0$ и $\Xi_b(6330)^0$, но их природа и квантовые числа нуждаются в дальнейших измерениях.

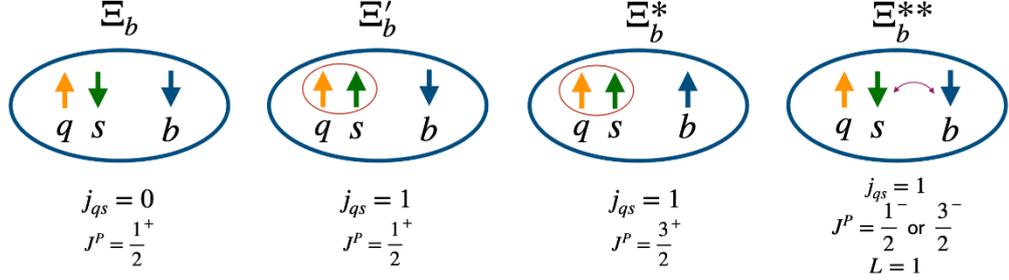


Рис. 1. Кварк-спиновая конфигурация для легчайших Ξ_b изодублетов, где q обозначает u (up) кварк для Ξ_b^0 или d (down) – для Ξ_b^- состояний

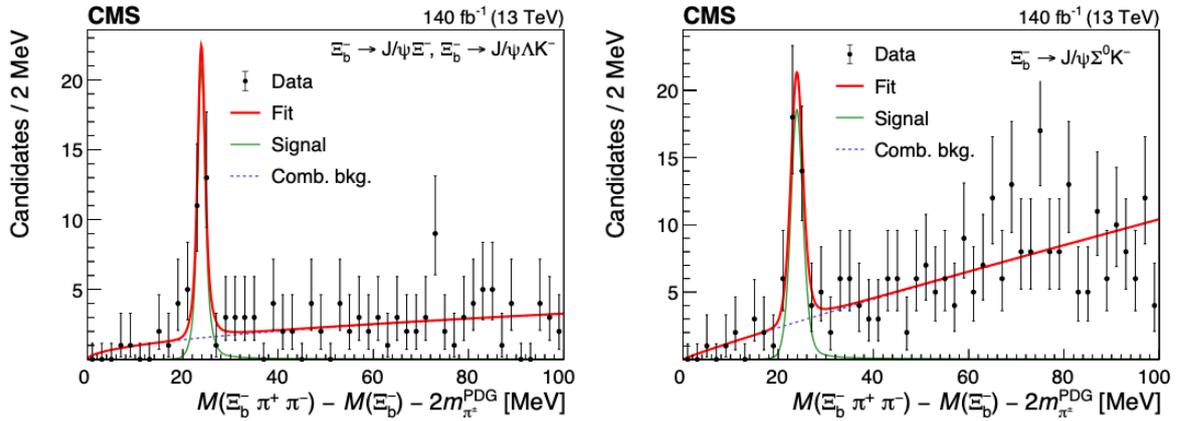


Рис. 2: Распределения по разнице инвариантных масс ΔM для отобранных $\Xi_b^-\pi^+\pi^-$ кандидатов, где Ξ_b^- восстановлен в каналах $J/\psi E^-$ и $J/\psi \Lambda K^-$ (слева) или частично восстановлен в канале $J/\psi \Sigma^0 K^-$ (справа). Также на данные наложены результаты аппроксимации

В настоящей работе [7] представлены результаты по первому обнаружению нового резонанса, орбитального возбуждения $\Xi_b(6100)^-$, в распаде $\Xi_b(6100)^- \rightarrow \Xi_b^{*0}\pi^- \rightarrow \Xi_b^-\pi^+\pi^-$, где Ξ_b^- барион распадается на $J/\psi E^-$ или $J/\psi \Lambda K^-$, причем в последнем распаде также учтен частично-восстановленный канал $J/\psi \Sigma^0 K^-$ (фотон из распада $\Sigma^0 \rightarrow \Lambda \gamma$ слишком мягкий для детектирования). В работе использованы данные 2016–2018, набранные экспериментом CMS [8] на БАК с энергией в системе центра масс $\sqrt{s} = 13\text{TeV}$. Критерии отбора были оптимизированы с использованием Punzi FOM [9] и включают в себя требования на значимый отлет вторичных вершин распадов от первичной вершины pp -столкновений, на поперечные импульсы и псевдобыстроты частиц, косинусы углов между импульсами и векторами, соединяющими вершины распадов и аналогичные.

Полученные распределения по инвариантной массе $\Xi_b^-\pi^+\pi^-$ представлены на рис. 2. Так как данные компьютерной симуляции (методом математического моделирования Монте-Карло) показывают различное детекторное разрешение для событий, полученных в полностью восстановленных и частично восстановленных распадах Ξ_b^- , данные разбиты на два соответствующих набора. Явный пик вблизи порога по разности масс в обоих наборах свидетельствует о присутствии резонансной структуры. Для математического описания полученных распределений использована одновременная (simultaneous) аппроксимация двух наборов данных. Сигнал описан свёрткой релятивистской функции Брейт–Вигнера и гауссового разрешения (зафиксировано из симуляции), где масса и ширина резонанса – общие параметры в одновременной аппроксимации. Фон моделируется пороговой функцией $(\Delta M)^\alpha$.

В результате аппроксимации получено 26 ± 7 сигнальных событий в полностью восстановленных каналах Ξ_b^- и 34 ± 9 – в частично восстановленном. Измеренная разница масс составила $\Delta M_{\Xi_h(6100)^-} = 24.14 \pm 0.22(stat) \pm 0.05(syst) MeV$, что, с использованием известной из PDG массы Ξ_b^- (равной $5797.0 \pm 0.6 MeV$ [1]), дает нам итоговую массу нового резонанса:

$$M(\Xi_h(6100)^-) = 6100.3 \pm 0.2(stat) \pm 0.1(syst) \pm 0.6(\Xi_b^-) MeV.$$

Небольшое число сигнальных данных и большое детекторное разрешение не дают возможность провести точное измерение ширины частицы, поэтому был поставлен верхний предел $\Gamma(\Xi_b(6100)^-) < 1.9 MeV$ с 95% доверительным интервалом (CL). Статистическая значимость сигнала, вычисленная методом разницы функций наибольшего правдоподобия, составила более 6 стандартных отклонений, что позволяет заявить об успешном первом обнаружении нового бариона. С учетом аналогов в секторе прелестных частиц, новый резонанс и его распад совместны с гипотезой, что это – легчайшее орбитальное возбуждение Ξ_b^- бариона с $J^P = 3/2^-$ и $L = 1$ между b кварком и легким ds дикварком. Обнаружение этого резонанса и измерение его массы и ширины позволяет нам лучше понять природу сильного взаимодействия и поможет определять корректность теоретических моделей КХД, вычисляющих параметры возбужденных состояний Ξ_b барионов.

Литература

2. Zyla P. A. [et al.]. (Particle Data Group) // 2020 Prog. Theor. Exp. Phys. 2020 083C01.
3. Chatrchyan S. [et al.]. (CMS) // 2012 Phys. ReV. Lett. 108 252002 (arXiv:1204.5955).
4. Aaij R. [et al.]. (LHCb) // 2015 Phys. ReV. Lett. 114 062004 (arXiv:1411.4849).
5. Aaij R. [et al.]. (LHCb) // 2016 JHEP 05 161 (arXiv:1604.03896).
6. Aaij R. [et al.]. (LHCb) // 2018 Phys. ReV. Lett. 121 072002 (arXiv:1805.09418).
7. Aaij R. [et al.]. (LHCb) // 2021 Phys. ReV. D 103 012004 (arXiv:2010.14485).
8. Sirunyan A. M. [et al.]. (CMS) // 2021 Phys. ReV. Lett. 126 252003 (arXiv:2102.04524).
9. Chatrchyan S. [et al.]. (CMS) // 2008 JINST 3 S08004.
10. Punzi G. // 2003 p MODT002 eConf C030908 (arXiv:physics/0308063).

УДК 53.01

Влияние энергии первичного электрона на развитие лавин релятивистских убегающих электронов

Д.И. Землянская^{1,2}, Е.М. Стадничук^{1,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт ядерных исследований РАН

³Национальный исследовательский университет «Высшая Школа Экономики»

В атмосферной физике тема лавин релятивистских убегающих электронов (Relativistic Runaway Electron Avalanche) широко исследуется для выявления причин возникновения молний и наземных гамма вспышек (Terrestrial Gamma-ray Flashes). Затравочным для обоих процессов является первичная частица, которая задает ход дальнейшему процессу. Помимо таких характеристик системы, как напряженность электрического поля, плотность воздуха, размеры распространения области лавины, интересуют также такой параметр, как энергия первичной частицы, а также возможность распространения сразу нескольких лавин от одного начального электрона. Этим вопросам и посвящен данный доклад.

В работе изучено развитие лавин релятивистских убегающих электронов при различных энергиях первичной частицы. Было проверено предположение о стационарности спектра лавины, а также о количестве рожденных частиц при распространении на расстояния много больших стандартных длины нарастания в схожих системах. Полученные результаты подтверждают данные предположения. Также было проведено сравнение суммарного количества рожденных электронов и из них – убегающих.

С целью обнаружения факторов для развития сразу нескольких лавин при высокоэнергетичных первичных частиц было рассмотрено распределение и общее количество частиц, рожденных вторичными электронами. На данном этапе не было найдено ни единого случая возникновения сразу двух лавин.

Результаты получены в ходе моделирования лавинообразования с помощью библиотеки Geant4.

Литература

1. Гуревич А.В., Зыбин К.П. 2001. Пробой на убегающих электронах и электрические разряды во время грозы. Успехи физических наук, 117, 11, 1177–1198.
2. Dwyer J., Babich L. 2011. Low-energy electron production by relativistic runaway electron avalanches in air. Journal of Geophysical Research, 116, 1–14.
3. Allison J. et al. 2016 «Recent developments in GEANT4» Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment 835, 186–225
4. Dwyer J., Babich L. 2011. Low-energy electron production by relativistic runaway electron avalanches in air. Journal of Geophysical Research, 116, 1–14.

УДК 539.1

Исследование линейности отклика фотоэлектронных умножителей детектора ДАНСС

Д.А. Бородулина

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

Детектор ДАНСС представляет собой сцинтилляционный спектрометр реакторных антинейтрино. Основной регистрирующий объем ДАНСС выполнен в виде 2500 пластин (стрипов) органического сцинтиллятора. Каждый стрип просматривается индивидуальным кремниевым ФЭУ, а группы из 50 стрипов выведены на 50 вакуумных ФЭУ [1]. Настоящая работа посвящена изучению линейности отклика вакуумных ФЭУ. Для целей тестирования и калибровки свет от общего светодиода был разведен с помощью оптических волокон на фотокатоды всех ФЭУ, при этом оптические связи между исходным светодиодом и ФЭУ оказались очень разными. Также был проведен независимый эксперимент, в котором свет был разведен не только на фотокатоды всех ФЭУ, но и на два кремниевых фотоумножителя.

Линейность исследуется с помощью откликов кремниевых фотоумножителей в предположении того, что их отклики пропорциональны энергиям вспышек светодиода. Для этого в начале проводится коррекция откликов кремниевых фотоумножителей на насыщение согласно формуле:

$$N_{fired} = N_{eff} \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{N_{pix}}{N_{eff}}\right) \right)$$

где N_{fired} – число сработавших пикселей кремниевого фотоумножителя, N_{pix} – число пикселей, которое должно было бы сработать, если бы свет не мог попадать в пиксель больше одного раза, N_{eff} – эффективное число пикселей, участвующих в регистрации света, $N_{fired} = N_{pe} \cdot c$, где N_{pe} – количество фотоэлектронов (то, в чем выражен отклик кремниевого фотоумножителя), c – величина кросстокла. Кремниевые фотоумножители дают отклики в разных диапазонах вспышек светодиода, но наличие у них общей области позволят сделать из этих энергий откликов единую шкалу, которую можно использовать в качестве энергий вспышек светодиода для исследования линейности ФЭУ. Построен график зависимости энергии отклика второго кремниевого фотоумножителя от энергии отклика первого, из которой видна пропорциональность между вспышкой и откликом для самих кремниевых ФЭУ (рис. 1).

Сразу после этого можно построить гистограмму, показывающую распределение коэффициентов оптической связи для разных ФЭУ (рис. 2). Из этой гистограммы видно, насколько коэффициенты оптической связи разные для разных каналов. Из-за этого для одной и той же энергии вспышки энергии отклика на нее лежат в широком диапазоне, что позволяет проводить исследование на линейность.

В результате этого исследования получается откалибровать фотоэлектронные умножители так, чтобы по известным точкам с энергией отклика порядка 18 МэВ (от прохождения мюона) можно было определять энергии вспышки при энергиях отклика порядка 3 МэВ, что соответствует наиболее интересному диапазону энергий при регистрации реакторных антинейтрино. Для каждого ФЭУ берутся три точки с откликом, близким к 18 МэВ, и три точки с откликом, близким к 3 МэВ (рис. 3).

По этим точкам проводится прямая и определяются энергии вспышек, дающие отклик в 3 и 18 МэВ соответственно. После чего вычисляется отклонение от полученной для 3 МэВ точки до прямой, проведенной из 0 в точку с откликом 18 МэВ. Полученное число является мерой нелинейности данного ФЭУ. Построена гистограмма этого отклонения (рис. 4). Результат будет использован в дальнейших исследованиях на детекторе ДАНСС.

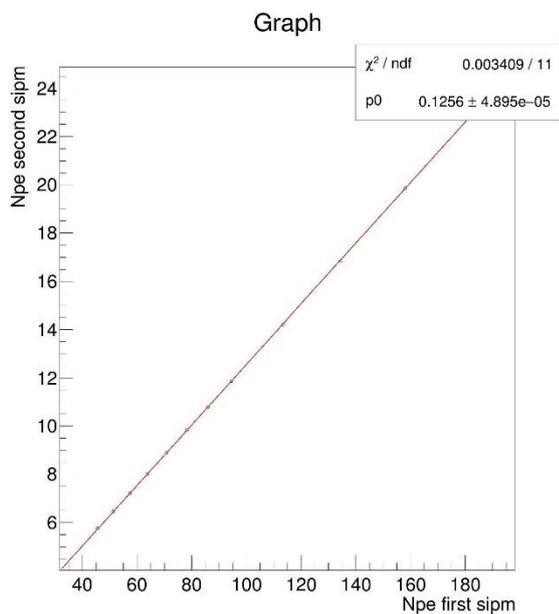


Рис. 1. Зависимость энергии отклика второго кремниевого фотомножителя от энергии отклика первого

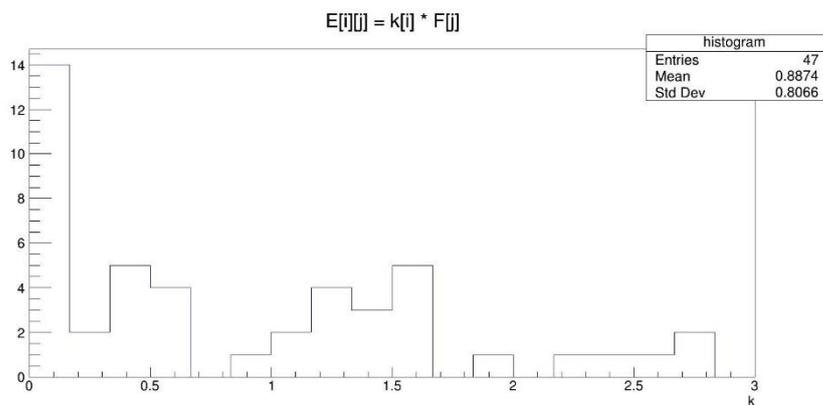


Рис. 2. Гистограмма коэффициентов оптической связи

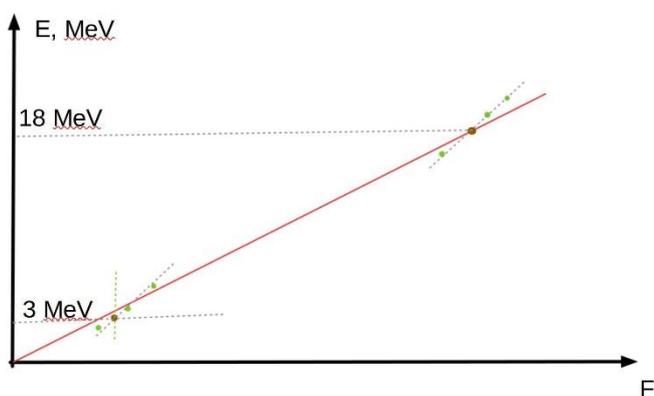


Рис. 3. Способ оценки нелинейности ФЭУ

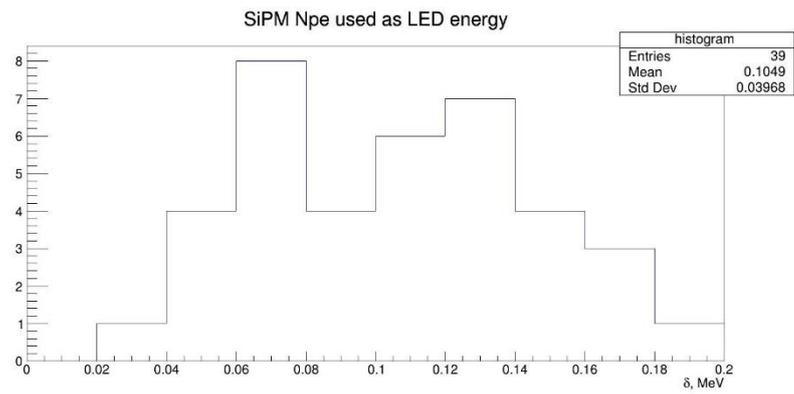


Рис. 4 Гистограмма отклонений на уровне 3 МэВ относительно прямой, проведенной через 18 МэВ

Литература

1. *Alekseev I. et al.* DANSS: Detector of the reactor AntiNeutrino based on Solid Scintillator // 2016 JINST 11 P11011.

Секция биофизики

УДК 54.07

ДНК-наносенсор на основе магнитных наночастиц для обнаружения и генотипирования *Mycobacterium tuberculosis* при температурах окружающей среды

Д.А.Горбенко¹, М.Ю.Березовская¹, М.С. Рубель¹, Д.М. Колпащиков^{1,2}

¹Университет ИТМО

²Университет Центральной Флориды

Для оценки эпидемиологии инфекционных заболеваний, таких как туберкулез, важным аспектом является раскрытие путей передачи и распространения штаммов в окружающей среде. Активно используются следующие методы: гель-электрофорез в ультрафиолетовом поле (PFGE), анализ случайной амплифицированной полиморфной ДНК (RAPD), анализ полиморфизма длины амплифицированного фрагмента (AFLP), типирование мультилокусных последовательностей (MLST), картирование делеций и делиготипирование, методы на основе гибридизации ДНК, методы на основе секвенирования ДНК [1].

Основная техника, применяемая в данном проекте для детекции и генотипирования *M. tuberculosis*, это дизайн ДНК-наносенсоров на основе разделенных ДНК-проб. Этот метод основан на подборе фрагмента детектируемого генома, содержащего участок с однонуклеотидным полиморфизмом. После выбора и оценки вторичной структуры одноцепочечного фрагмента, подбираются два чувствительных гибридизационных зонда разной длины с температурами гибридизации выше температуры постановки реакции. После этого, на основе гибридизационных участков, создаются бинарные сенсоры, которые имеют участки, комплиментарные не только к фрагменту интереса, но и к репортерной молекуле.

Данный подход имеет определенные преимущества:

1. Возможность вариации длин гибридизационных «рук» позволяет лучше детектировать однонуклеотидные замены за счет укорачивания одного из гибридизационных фрагментов;
2. За счет того, что одна из гибридизационных «рук» может быть удлинена, она может связываться с конформационно сложными участками и расплетать их;
3. Бинарные гибридизационные молекулы подбираются с учетом возможности использования одной или нескольких репортерных молекул, что упрощает создание всей системы и удешевляет ее синтез, поскольку репортерные молекулы единственные, которые подвергаются модификации флуорофорами или другими детектируемыми частицами.

Дизайн таких ДНК-наносенсоров происходит с помощью программ mFold [2] и NuPack [3], которые позволяют оценивать вторичные структуры и энергии гибридизации отдельных молекул нуклеиновых кислот.

Вторая техника, с которой будет объединен описанный подход, это мультиплексный биосенсор с возможностью количественного определения магнитных наночастиц для обнаружения кардио- и онкологических маркеров, малых молекул, олигонуклеотидов. В данном проекте будет показано, что он

может быть эффективно применен для детекции нуклеиновых кислот интереса. Для обнаружения олигонуклеотидов конъюгаты соответствующих им комплементарных последовательностей с магнитными наночастицами могут быть нанесены на тест-полоски [4].

Мы предлагаем объединение этих подходов и усовершенствование системы, для возможности количественной детекции РНК без амплификации в формате *ex vivo*, и последующую возможную интеграцию в *in vivo* формат.

Для объединения этих двух методов будут созданы сенсоры, а также репортерная проба и якорная молекула, которые могут быть прикреплены к магнитной наночастице и стрептавидиновой подложке соответственно. Ожидается, что техника позволит количественно детектировать и генотипировать 10–100 нМ *M. tuberculosis* при комнатной температуре без амплификации.

Литература

1. Collins D.M. and de Lisle G.W. DNA restriction endonuclease analysis of Mycobacterium tuberculosis and Mycobacterium bovis BCG // Journal of General Microbiology. 1984. V. 130. 4. P. 1019–1021.
2. Markham N.R., Zuker M.M. UNAFold. In: Keith J.M. (eds) Bioinformatics // Methods in Molecular Biology. 2008. V. 453.
3. Zadeh J.N., Steenberg C. D., Bois J. S., Wolfe B. R., Pierce M. B., Khan A. R., Dirks R. M., Pierce N. A. NUPACK: analysis and design of nucleic acid systems // J. Comput Chem. 2011. V. 32. 170–173.
4. Zelepukin I.V., Yaremenko A.V., Petersen E.V., Deyev S.M., Cherkasov V. R., Nikitin P. I., Nikitin M.P. Magnetometry based method for investigation of nanoparticle clearance from circulation in a liver perfusion model // Nanotechnology. 2019. V. 30. 10.

УДК 577.322.9

Исследование олигомеризации мембранных белков методом локализационной микроскопии одиночных молекул

Е.И. Бесценная¹, И.В. Маслов¹, А.Н. Юденко¹, Т. Гениш², В.И. Борщевский¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Institute of Biological Information Processing 1 (IBI-1: Molecular and Cellular Physiology),
Forschungszentrum Juelich

Степень олигомеризации – одна из структурных характеристик белков, которая помогает делать выводы об их функциях и механизмах работы. В случае мембранных белков их структура и функционирование во многом обусловлены нативным мембранным окружением. Поэтому важно иметь возможность исследовать такие белки непосредственно в мембране клетки. Эту возможность дают методы флуоресцентной микроскопии.

Современные методы флуоресцентной микроскопии позволяют преодолеть оптический дифракционный предел и локализовать одиночные молекулы с точностью до порядка десяти нанометров [1]. Локализационная микроскопия одиночных молекул может быть использована не только для получения изображений сверхвысокого разрешения, но и для количественного анализа биологических объектов, в том числе для подсчёта олигомеризации белков [2].

В данной работе олигомеризация мембранных белков исследуется методом флуоресцентной фотоактивируемой локализационной микроскопии [2]. Для этого мембранные белки, генетически связанные с флуоресцентным фотопереключаемым белком-репортером, экспрессируются в клетках нейробластомы человека. Данные микроскопии используются для анализа фотокинетики белка-репортера и определения степени олигомеризации исследуемого белка.

Целевым белком исследования является канальный родопсин 2 – светочувствительный семиспиральный ионный канал, важный оптогенетический инструмент. В структурных исследованиях, требующих выделения белка из нативного окружения, наблюдалась стабильная димеризация канального родопсина 2 [3, 4]. Метод флуоресцентной фотоактивируемой локализационной микроскопии позволяет определить, димеризован ли канальный родопсин 2 также и в клеточной мембране. В качестве калибровочных образцов используются мембранные белки с известной степенью олигомеризации.

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-54-12010.

Литература

1. Rust, M., Bates, M., Zhuang X. Sub-diffraction-limit imaging by stochastic optical reconstruction microscopy (STORM) // Nat Methods. 2006. V. 3. P. 793–796.

2. Fricke, F., Beaudouin, J., Eils, R., Heilemann M. One, two or three? Probing the stoichiometry of membrane proteins by single-molecule localization microscopy // *Sci Rep*. 2015. V. 5. 14072/
3. Müller M, Bamann C, Bamberg E, Kühlbrandt W. Projection structure of channelrhodopsin-2 at 6 Å resolution by electron crystallography // *J Mol Biol*. 2011. V. 414. P. 86–95/
4. Volkov O, Kovalev K, Polovinkin V, Borshchevskiy V, Bamann C, Astashkin R, Marin E, Popov A, Balandin T, Willbold D, Büldt G, Bamberg E, Gordeliy V. Structural insights into ion conduction by channelrhodopsin 2 // *Science*. 2017. V. 358. I. 6366/

УДК: 577.322

Исследование фотофизических свойств рецептора, сопряженного с G-белком, при помощи сольватохромных красителей на основе хромофора GFP

А.С. Белоусов¹, И.А. Маслов¹, П.А. Хорн¹, А.С. Мишин², М.С. Баранов², В.И. Борщевский¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

Данный рецептор, связанный с G-белком (GPCR), представляет собой трансмембранный белок с семью α -спиралями. Этот регулирует потребность миокарда в кислороде и увеличивают коронарное кровообращение за счет расширения сосудов. Кроме того, этот рецептор может подавлять активность иммунных клеток, тем самым защищая ткани от воспаления. Рецептор также экспрессируется в головном мозге, где он играет важную роль в регуляции высвобождения глутамата и дофамина, что делает его потенциальной терапевтической мишенью для лечения бессонницы, болей, депрессии и болезни Паркинсона. [1].

Для изучения белков и нахождения лигандов используются различные методы, например флуоресцентная спектроскопия. Существует несколько типов красителей для применения в флуоресцентной спектроскопии. Сольватохромные флуоресцентные красители способны изменять свой спектр флуоресценции в зависимости от окружающей их среды. Таким образом, с помощью красителей такого типа возможно отслеживать различные состояния белка и проверять, взаимодействуют ли исследуемые белки с предполагаемыми лигандами. Так как при связывании лиганда меняется конформация белка, то будет изменяться и локальное окружение красителя, что повлечет за собой изменения в спектрах эмиссии и возбуждения флуоресценции.

Для изучения структуры рецептора, поиска лигандов ранее применялось множество биофизических методов, в том числе ЯМР, кристаллография [2], криоэлектронная микроскопия [3], флуоресцентная микроскопия (с использованием методов FRET и FLIM) [4], методы молекулярной динамики, связывание радиогандов. Было найдено множество лигандов, в числе которых кофеин, теofilлин, аденозин и регаденозон.

Целью данной работы является поиск сольватохромных флуоресцентных красителей, которые были бы пригодны для определения конформационного состояния рецептора. Так как каждый лиганд по-разному меняет конформацию белка, то такие красители позволят находить новые лиганды и определять, в каком состоянии находится белок в конкретный момент времени. Открытие новых лигандов дает понимание, в каких процессах в организме участвует белок, а это дает новые возможности в терапии. Мы исследовали 2 красителя, основанные на хромофорном ядре GFP, которые взаимодействуют с цистеинами в белке с помощью малеимид-тиолового взаимодействия [5]. Мы показали связывание рецептора с красителем и изменения фотофизических свойств при добавлении к белку агониста и антагониста.

Работа выполнена при поддержке Министерство науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-00337-20-03, проект FSMG-2020-0003).

Литература

1. Ohta A., Sitkovsky M. Role of G-protein-coupled adenosine receptors in downregulation of inflammation and protection from tissue damage // *Nature*. 2001. V. 414, N 6866. P. 916–920.
2. Doré A.S. et al. Structure of the adenosine A_{2A} receptor in complex with ZM241385 and the xanthenes XAC and caffeine // *Structure*. 2011. V. 19, N 9. P. 1283–1293.
3. García-Nafria J. et al. Cryo-EM structure of the adenosine A_{2A} receptor coupled to an engineered heterotrimeric G protein // *Elife*. 2018. V. 7. P. 1–19.
4. Maslov I. et al. Structural dynamics of the A_{2A} adenosine receptor revealed by single-molecule FRET // *FASEB J*. 2021. V. 35, N S1.

5. Smirnov A.Y. [et al.]. Design of red-shifted and environment-sensitive fluorogens based on GFP chromophore core // Dye. Pigment. Elsevier Ltd, 2020. V. 177, N October 2019. P. 108258.

УДК 577.322.63

Структурное исследование неканонической мономерной трансаминазы из *Desulfobacula toluolica*

И.О. Матюта^{1,2}, А.К. Бакунова¹, Николаева А.Ю¹, К.М. Бойко¹

¹ Институт биохимии им. А.Н. Баха, Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии»

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В последние десятилетия в связи с проблемой изменения климата в мире существует подогреваемый экологическими и экономическими стимулами устойчивый интерес к замене традиционных технологий химического синтеза на биотехнологии с участием ферментов-биокатализаторов (т.н. «green chemistry»). Поиск новых ферментов для биотехнологий ведется по аннотированным геномам и метагеномным данным, а разработка новых биокатализаторов осуществляется направленной модификацией характеристик природных ферментов для соответствия техническим требованиям процессов. Для корректной «настройки» целевого фермента необходимо провести его комплексную структурно-функциональную характеристику с тем, чтобы найти взаимосвязь между его свойствами, важными для прикладных задач (температурная стабильность, субстратная специфичность и др.), и структурными мотивами, определяющими эти свойства. Структурные исследования макромолекул подобного размера обычно проводятся методом рентгеноструктурного анализа, обеспечивающим необходимый уровень детализации.

Одним из перспективных биологических объектов для целей практического применения являются трансаминазы (аминотрансферазы). Это обширный класс ферментов, представители которого катализируют обратимый стереоселективный перенос аминокислотной группы с аминсубстрата на кетон/кетокислоту/альдегид с получением хирального амина/аминокислоты и нового кетосоединения. Прикладные исследования трансаминаз направлены на разработку на их основе биокатализаторов стереоселективного аминирования органических соединений, в том числе получения неприродных D- и L-аминокислот, кетокислот, оптически активных аминов, а также на разработку каскадных ферментативных процессов, включающих стадию стереоселективного аминирования/деаминирования.

Установлено, что субстратная специфичность трансаминаз определяется двумя характеристическими мотивами в аминокислотной последовательности. Замены в таких мотивах могут существенным образом отражаться на характеристиках фермента. В этой связи фундаментально интересным является выяснение структурной и функциональной роли отдельных аминокислотных остатков характеристических мотивов. В рамках настоящей работы проведено структурное исследование необычной мономерной трансаминазы D-аминокислот из граммотрицательной бактерии *Desulfobacula toluolica* (Tol), имеющей природные замены в характеристических мотивах. Была установлена кристаллическая структура Tol с разрешением 2.6 Å и проведён её детальный сравнительный анализ с гомологами.

Выделение, очистка и кристаллизация трансаминазы Tol выполнены при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (№ 19-14-00164).

Микромасштабный термофорез в исследовании взаимодействия микобактериальных цитохромов P450 с азольными соединениями

И.А. Капранов¹, М.А. Карпова³, Ю.А. Загрядская¹, И.С. Охрименко¹, Т.С. Варакса², А.А. Гилен^{2,4},
Н.В. Струшкевич³, В.И. Борщевский¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт биоорганической химии НАН Беларуси

³Сколковский институт науки и технологий

⁴Институт биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича

Цитохромы P450 – широко распространенные белки, участвующие в синтезе и метаболизме стероидов, ненасыщенных жирных кислот и фенольных производных, а также они задействованные в выведении из клетки чужеродных веществ [1]. Ранее было показано, что соединения азольного ряда, ингибирующие активность цитохромов P450, подавляют рост *Mycobacterium tuberculosis* – возбудителя туберкулеза, одного из самых смертоносных заболеваний [2]. В предыдущих работах мы показали, что CYP124, CYP125 и CYP142 могут связываться и метаболизировать ряд иммуноактивных оксистеролов человека *in vitro* [3], а также участие CYP124 в метаболизме противотуберкулезного соединения, находящегося на стадии клинических испытаний [4]. Таким образом, ингибирование цитохромов P450 является перспективной стратегией для разработки новых противотуберкулезных препаратов.

Существующие методы исследования взаимодействия цитохромов P450 с лигандами (спектральное титрование и поверхностный плазмонный резонанс) имеют ряд ограничений. В настоящей работе мы использовали альтернативный метод – микромасштабный термофорез (MST), который не использовался ранее для изучения цитохромов P450.

Измерения, для которых микобактериальный цитохром CYP124 был флуоресцентно помечен красителем Cy3-HNS, были проведены на приборе Monolith NT.115 (NanoTemper Technologies). Полученные кривые MST были использованы для расчета констант диссоциации CYP124 с рядом азольных соединений: эконазолом, кетоконазолом, итраконазолом и миконазолом. Полученные значения констант сравнимы с таковыми, рассчитанными из спектрофотометрического титрования.

Таким образом, MST может быть использован для изучения связывания цитохромов семейства P450 с низкомолекулярными лигандами, особенно в тех случаях, когда классические подходы неприменимы.

Данная работа была поддержана совместным исследовательским грантом Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (Б20Р-061) и Российского фонда фундаментальных исследований (20-54-00005).

Литература

1. Denisov I.G. [и др.]. Structure and Chemistry of Cytochrome P450 // Chemical Reviews. 2005, № 6 (105). С. 2253–2278.
2. Ortega Ugalde S. [и др.]. Function, essentiality, and expression of cytochrome P450 enzymes and their cognate redox partners in *Mycobacterium tuberculosis*: are they drug targets? // Applied Microbiology and Biotechnology. 2019. Т. 103, № 9. 3597–3614 с.
3. Varaksa T. [и др.]. Metabolic Fate of Human Immunoactive Sterols in *Mycobacterium tuberculosis* // Journal of Molecular Biology. 2021.
4. Bukhdruker S. [и др.]. Hydroxylation of Antitubercular Drug Candidate, SQ109, by *Mycobacterial* Cytochrome P450 // International Journal of Molecular Sciences. 2020.

Метод микромасштабного термофореза в исследовании лиганд-белковых взаимодействий GPCR-рецепторов

Д.Е. Дашевский, А.П. Лугинина, П.А. Хорн, В.С. Шаульская, Л.М. Василенко, А.В. Мишин

Центр исследований молекулярных механизмов старения и возрастных заболеваний
Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рецепторы, сопряжённые с G-белком (GPCR), являются наиболее интенсивно изучаемыми лекарственными мишенями благодаря их существенному участию в патофизиологии человека [1]. Измерение константы связывания рецептора и его лигандами позволяет определить возможных кандидатов на роль лекарственных препаратов, а также оценить функциональность рецептора при внесении мутаций в аминокислотную последовательность белка. Микромасштабный термофорез (Microscale Thermophoresis, MST) позволяет проводить количественный анализ белковых взаимодействий в свободном растворе в экспериментах с низким потреблением образца. Для определения константы взаимодействия в MST методе измеряется подвижность молекул в температурном градиенте. При связывании изучаемого белка с молекулой-партнёром его подвижность в растворе изменяется, что может быть детектировано по флуоресценции одного из партнёров по связыванию [2].

Нанодиски – молекулярная конструкция, разработанная для стабилизации мембранных белков в растворе путём моделирования мембраны клетки [3–4]. В данной работе в белки мембранного каркаса «Membrane Scaffold Protein» (MSP), образующие основу нанодиска, были произведены точечные вставки цистеина для взаимодействия с малеимидными красителями.

Целью данной работы является разработка технологии для быстрого и точного измерения константы связывания GPCR рецептора с его лигандами при помощи метода MST и адаптированных для этого метода нанодисков.

Работа выполнена при поддержке Государственного задания РФ (соглашение № 075-00337-20-03, проект FSMG -2020-0003).

Литература

1. *Hauser A.S. et al.* Trends in GPCR drug discovery: New agents, targets and indications // *Nat. Rev. Drug Discov.* Nature Publishing Group, 2017. V. 16, № 12. P. 829–842.
2. *Seidel S.A.I. et al.* Microscale thermophoresis quantifies biomolecular interactions under previously challenging conditions // *Methods.* Academic Press Inc., 2013. V. 59, № 3. P. 301–315.
3. *Denisov I.G., Sligar S.G.* Nanodiscs in Membrane Biochemistry and Biophysics // *Chem. Rev.* 2017. V. 117, № 6. P. 4669–4713.
4. *Denisov I.G. et al.* Directed Self-Assembly of Monodisperse Phospholipid Bilayer Nanodiscs with Controlled Size // *J. Am. Chem. Soc.* 2004. V. 126, № 11. P. 3477–3487.

Связывание иона натрия в рецепторах CysLT₁R и CysLT₂R класса GPCR

*В.С. Шаульская¹, Э.Ф. Ком², А.П. Лугинина¹, П.А. Хорн¹,
В.И. Борщевский¹, К.С. Минеев², А.В. Мишин¹*

¹ Центр исследований молекулярных механизмов старения и возрастных заболеваний,
Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

Рецепторы, сопряженные с G-белком (GPCR) – крупное семейство мембранных белков, отвечающих за передачу внешних стимулов внутрь клетки. Нарушение их сигнализации приводит к широкому спектру заболеваний, поэтому изучение GPCR важно для фундаментальной науки и медицины. Например, цистеинил-лейкотриеновые рецепторы, CysLT₁R и CysLT₂R, исследуемые в данной работе – одни из ключевых участников в воспалительных процессах. На данный момент GPCR являются мишенью для более 30% терапевтических препаратов. Но, к сожалению, существующие сейчас препараты не всегда специфичны и обладают рядом побочных эффектов, таким образом, определение структуры GPCR и понимание молекулярного механизма активации рецепторов представляет не только фундаментальный биологический интерес, но и обладает большим потенциалом для медицины [1, 2].

Класс А, или родопсиноподобные GPCR, составляет бóльшую часть этого суперсемейства и является наиболее изученным. Известно, что в активации GPCR класса А участвует ион натрия, связывающийся с рецептором в консервативном аллостерическом кармане, включающем аспарагин, расположенный на второй трансмембранной спирали [3]. Однако точный механизм участия Na⁺ в функционировании белков не установлен, в частности и у исследуемых в данной работе рецепторов CysLT₁R и CysLT₂R [3]. Ион натрия в CysLT₁R координируется одной молекулой воды и четырьмя боковыми цепями, при этом в CysLT₂R, его ближайшем гомологе, натрий в кармане не был обнаружен.

В данной работе связывание натрия с рецепторами анализировалось двумя методами. Во-первых, исследовалась термостабильность белков, в ходе чего было показано, что физиологическая концентрация иона натрия 150 мМ повышает температуру плавления CysLT₁R дикого типа примерно на 8° С, но при этом данный эффект не наблюдался для CysLT₂R дикого типа. Во-вторых, проводились исследования рецепторов при помощи ²³Na ЯМР-релаксации. Времена релаксации позволяют точно описать многие биологические процессы, так, например, для связывания натрия с рецептором было получено, что разница обратных величин времен релаксации пропорциональна отношению количества связанного с рецептором натрия к несвязанному [4]. Ранее данный метод позволил напрямую оценить кинетику связывания иона натрия для Апо-А_{2A}AR и при насыщении обратным агонистом, тем самым подтвердив влияние иона на функционирование рецептора [5]. В рамках данной работы проводились подобные измерения ЯМР-релаксации для исследуемых рецепторов. Дальнейшее исследование сайта связывания Na⁺ методом ЯМР-релаксации позволит более точно определить наличие и константу связывания натрия рецепторами, а также сделать некоторые выводы о механизмах активации рецепторов, относящихся к дельта-ветви GPCR класса А.

Литература

1. Luginina A. [et al.]. Structure-based mechanism of cysteine leukotriene receptor inhibition by antiasthmatic drugs // *Sci. Adv.* 2019. V. 5.
2. Hauser A. [et al.]. Pharmacogenomics of GPCR Drug Targets // *Cell.* 2018. V. 172. P. 41–54.
3. Katritch V. et al. Allosteric sodium in class A GPCR signalling // *Trends Biochem Sci.* 2014. V. 39. P. 233–244.
4. Woessner D. . [et al.]. NMR Relaxation of spin 3/2 Nuclei: Effects of Structure, Order and Dynamics in Aqueous Heterogeneous Systems // *Concept Magn. Res.* 2001. V. 13. P. 294–325.
5. Libin Y. [et al.]. Mechanistic insights into allosteric regulation of the A_{2A} adenosine G protein-coupled receptor by physiological cations // *Nature Communications* 2018. V. 9. P. 1372.

УДК 577.151.45

Исследование расщепления белкового комплекса NpSRII/NpHtrII

Д.Д. Кулина¹, Ю.Л. Рижиков^{1,2}, М.И. Рулёв^{2,3,4}, А.И. Кулин^{1,2}, В.И. Горделий^{1,3,4,5}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый Институт Ядерных Исследований

³Institute of Biological Information Processing (IBI-7: Structural Biochemistry), Юлих, Германия

⁴JuStruct: Jülich Center for Structural Biology, Forschungszentrum Jülich, Юлих, Германия

⁵Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Гренобль, Франция

Для исследования предлагается фоторецепторный комплекс архей, состоящий из сенсорного родопсина II (SRII) и его родственного трансдюсера (HtrII) из *Natronomonas pharaonis*. Фоторецепторы (как и хеморецепторы и сенсорные гистидин-киназы) являются трансмембранными рецепторами двухкомпонентных сигнальных систем (ДКС) – самой распространённой сигнальной системы в природе, которая отсутствует в клетках млекопитающих. В связи с этим комплекс NpSRII/NpHtrII представляет особый интерес для изучения механизмов передачи сигнала ДКС через мембрану.

Получение полноразмерной структуры высокого разрешения является важным этапом исследования, при котором, однако, возникают трудности. Мы столкнулись с тем, что при попытке кристаллизации комплекса NpSRII/NpHtrII методом *in meso* [1] получались либо кристаллы SRII, либо его же в комплексе с ТМ-доменом HtrII [2]. Это наблюдалось и при кристаллизации полноразмерной конструкции, и для конструкций с одним и двумя НАМР-доменами. Очевидно, имеет место расщепление трансдюсера, но механизм этого процесса пока неизвестен. В работе рассматривается гипотеза, согласно

которой расщепление происходит вследствие протеолиза. Установление отвечающей за это протеазы, является важной задачей для предотвращения деградации белкового комплекса. Стоит отметить, что процесс расщепления наблюдается не только в кристаллизованном матриксе, но и на более ранних стадиях – для солубилизованного в детергенте очищенного белка; однако в этом случае процесс протекает менее активно.

Наиболее вероятным источником протеаз являются клетки *E. coli* – экспрессионный штамм, от белков которого не удаётся очиститься на 100% даже после последовательно применённых трёх методов очистки – металл-хелатной аффинной хроматографии, анион-обменной хроматографии и гель-фильтрации. Чтобы узнать, к какому(им) типу(ам) относится(ятся) протеазы, ответственные за наблюдаемое расщепление *NpHtrII*, мы добавили следующие ингибиторы протеаз: EDTA (ингибитор металлопротеиназ), 6-аминогексановая кислота (6АНА, ингибитор сериновых протеаз) и cOplete (коммерчески доступная смесь из нескольких ингибиторов сериновых протеаз). EDTA, 6АНА и cOplete использовались в как по отдельности, так и в различных сочетаниях. Образцы с разными ингибиторами протеаз были разделены на три части, которые были помещены в условия с температурами 4, 20 и 37 °С на 2 недели. В настоящей работе представлены результаты влияния температуры на активность протеаз, а также предположения об их происхождении.

Данные электрофореза позволяют сделать вывод, что при температуре 20 °С, скорость протеолиза наибольшая. При 4 °С наблюдалось некоторое замедление протеолиза по сравнению с 20 °С. При температуре 37 °С протеолиз также наблюдается, но в значительно меньшей степени. Это может указывать бóльшую чувствительность к высокой температуре протеаз, чем белков. На основе этого результата можно предложить такую стратегию ингибирования протеаз, как воздействие высокой температуры (40-60 °С). Эффективность такого подхода ещё предстоит проверить.

По результатам сравнения электрофореза образцов с разными ингибиторами, но находившихся при одной температуре, можно сделать вывод, что основной эффект ингибирования даёт EDTA, однако полностью избавиться от протеолиза он не помогает. Это даёт основания полагать, что существенную роль в протеолизе играют металлопротеиназы, против которых есть средства, однако, какую природу имеют оставшиеся протеазы, ещё предстоит выяснить.

Литература

1. *Caffrey M.* A comprehensive review of the lipid cubic phase or in meso method for crystallizing membrane and soluble proteins and complexes // *Acta Cryst.* 2015. V. F71. P. 3–18.
2. *Gordeliv V. I. [et al.].* Molecular basis of transmembrane signalling by sensory rhodopsin II–transducer complex // *Nature.* 2002. V. 419. P. 484–487.

УДК 577.322.2

Исследование бактериальных сенсоров оксида азота семейства FIST

Е.А. Кузнецова, А.Н. Юденко, И.Ю. Гуцин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В работе описаны результаты по изучению семейства белковых доменов *FIST* (F-box and intracellular signal transduction proteins). Оно было обнаружено с использованием биоинформатических методов в 2007 году [2], при этом данные о роли и функционировании доменов были получены лишь недавно, в 2017 г. [1].

Мы приняли решение провести это исследование, поскольку на сегодняшний день отсутствует какая-либо опубликованная информация о структуре и функционировании на атомарном уровне белков, содержащих *FIST*-домены. Данные белки широко распространены среди бактерий, включая патогенные (например: *Pseudomonas aeruginosa* – синегнойная палочка, *Legionella pneumophila* – возбудитель «болезни легионеров»), а также встречаются у архей и эукариот.

Для некоторых из белков, содержащих домен *FIST*, было показано, что они связывают гем и являются сенсорами оксида азота NO – двухатомной молекулы газа, которая при низких концентрациях играет важную сигнальную роль как у эукариот, так и у бактерий. Также эти белки участвуют в регуляции формирования и дисперсии бактериальных пленок. Они образуются, когда свободно плавающие бактерии объединяются в группу, обычно на твердой поверхности. Бактерии, живущие в пленках, большая проблема для человека, ведь они вызывают многие хронические инфекции, представляют значительную угрозу для безопасности пищевых продуктов и воды, орошения и многого другого. Они

не поддаются традиционной терапии, поскольку обладают высокой устойчивостью к антибиотикам, защитным средствам организма и даже некоторым сильным химическим обработкам.

Несмотря на огромное число исследований, связанных с изучением бактериальных пленок, все еще остаются пробелы в понимании фундаментальных, в том числе молекулярных, основ образования и дисперсии биопленок. На данный момент известно, что сигнальная молекула NO вызывает рассеивание плёнок *P. aeruginosa*, даже при низких пикомолярных концентрациях. Вышеизложенное рождает интерес к исследованию молекулярных механизмов регуляции метаболизма бактерий посредством NO. Предположительно, функцию NO-сенсоров могут выполнять FIST-домен-содержащие белки.

Необходимо еще раз подчеркнуть, что механизм действия FIST-доменов неизвестен, в частности, на сегодняшний день не опубликовано ни одной атомарной структуры из семейства FIST-доменов. Не ясно, какие именно аминокислотные остатки отвечают за связывание гема и предполагаемого лиганда NO, и каким образом происходит передача сигнала от этого домена другим частям белка и белкам-партнерам.

На настоящий момент нами были клонированы наиболее интересные с структурной и функциональной точки зрения гены, кодирующие FIST-домен-содержащие белки, произведена их гетерологическая экспрессия и очистка хроматографическими методами. Определены функциональные свойства спектрофотометрическими методами.

Литература

1. Hossain S., Boon, E.M. Discovery of a novel nitric oxide binding protein and nitric-oxide-responsive signaling pathway in *Pseudomonas aeruginosa* // ACS infectious diseases. 2017. 3(6), 454–461.
2. Borziak K., Zhulin, I.B. FIST: a sensory domain for diverse signal transduction pathways in prokaryotes and ubiquitin signaling in eukaryotes // Bioinformatic. 2007.23(19), 2518–2521.

УДК 577.322.6

Новые мембрано-моделирующие системы и их применение в исследованиях структуры рецепторов, сопряженных с G-белком, с помощью криоэлектронной микроскопии

Л.М. Василенко, П.А. Хорн, Е.А. Маркева, А.В. Мишин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время заметно растет число белковых структур, полученных методом криоэлектронной микроскопии (крио-ЭМ), что свидетельствует об активном развитии методики. Однако до недавнего времени с помощью крио-ЭМ было сложно расшифровать структуры рецепторов, сопряженных с G-белком (GPCR), в связи с их нестабильностью вне нативного окружения. Для того чтобы приблизить условия к нативным, при работе с GPCR необходимо использовать различные мембрано-моделирующие системы (ММС). Кроме того, выбранные ММС должны обладать термостабильностью и гомогенностью для того, чтобы быть пригодными для крио-ЭМ. Именно эти дополнительные требования для ММС являлись основным ограничивающим фактором применимости крио-ЭМ в работе с данным семейством рецепторов.

Одним из решений этой задачи являются так называемые *циркуляризованные нанодиски*, представляющие собой липидный бислой, ограниченный циркуляризованным каркасным белком, который получается с помощью ковалентной сшивки своих C- и N-концов ферментом сортазой A [1]. Недавно была получена структура GPCR с применением именно этих нанодисков [2]. Альтернативным решением выступают нанодиски, каркасный белок которых циркуляризован посредством введения интеино-фрагментов в белковую последовательность [3]. Такие каркасные белки не требуют работы фермента и циркуляризуются во время посттрансляционной обработки *in vivo* за счет удаления интеиновых фрагментов, ведущей за собой сшивки C- и N-концов белка через цистеин. Несмотря на то, что циркуляризованные нанодиски, получаемые с помощью сортазы A, на данный момент являются более распространенными, их аналог, использующий интеиновые фрагменты, представляет большой интерес, так как процесс его очистки не требует ферментов и занимает меньше времени.

Для того чтобы изучить свойства GPCR, встроенных в описанные выше ММС, в качестве модельного белка был выбран цистеинил лейкотриеновый рецептор второго типа. Его термостабиль-

ность, олигомерность и гомогенность в новых ММС были измерены посредством метода анализа кривой плавления, гель-фильтрации и просвечивающей электронной микроскопии с негативным окрашиванием.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 19-14-00261.

Литература

1. *Nasr L.M. [et al.]*. Covalently circularized nanodiscs for studying membrane proteins and viral entry // *Nat. Methods*, 2017. 14(1):49–52.
2. *Zhang M. [et al.]*. Cryo-EM structure of an activated GPCR-G protein complex in lipid nanodiscs // *Nat. Struct. Mol. Biol.* 2017.
3. *Miehling J. [et al.]*. A Split-Intein-Based Method for the Efficient Production of Circularized Nanodiscs for Structural Studies of Membrane Proteins // *Chembiochem* 2018. Sep 17. 19(18):1927–1933.

УДК 577.322

Оптимизация метода получения каркасного белка для сборки нанодисков с GPCRs

Е.А. Маркеева, Л.М. Василенко, П.А. Хорн, Мишин А.В.

Московский физико-технический институт(национальный исследовательский университет)

Рецепторы, сопряженные с G-белком (GPCR), составляют большое семейство трансмембранных белков. Они являются мишенями для более чем 30% лекарств, представленных сейчас на рынке [1]. Исследования GPCR невозможны без применения различных мембраномоделирующих систем, из которых наиболее часто используемыми являются нанодиски с каркасными белками (например, MSP1D1) на основе аполипопротеина А.

Для получения MSP1D1 обычно используется аффинная хроматография с использованием полигистидиновой метки. Однако наличие метки на каркасном белке мешает дальнейшей сборке нанодисков и встраиванию в них GPCR. Это приводит к необходимости дополнительных манипуляций с белком по отрезанию полигистидиновой метки и очистке от нее и протеазы. Таким образом, процесс очистки каркасного белка, состоящий из трех этапов, оказывается трудоемким и затратным как по времени, так и по стоимости.

Для его упрощения был придуман метод на основе функции транспептидазы сортазы А, выделенной из *Staphylococcus aureus* [2]. Данный фермент широко используется при работе с белками [3], его применение для нового метода одноступенчатой очистки схематично показано на рис. 1. Этим способом можно относительно быстро получить большое количество целевого белка [2–4].

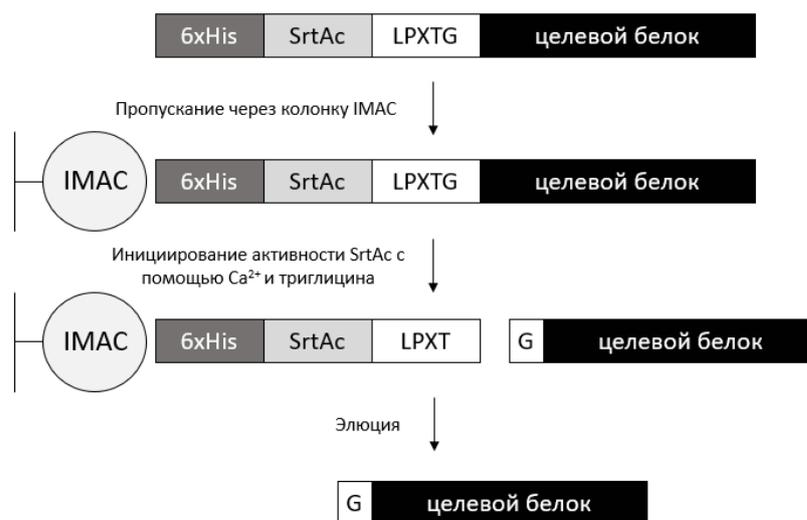


Рис. 1. Схема одноступенчатой очистки целевого белка с помощью фермента сортазы А [1]; химерный белок состоит из: бHis – полигистидиновой метки, SrtAc – каталитического центра сортазы А, LPXTG – сайта узнавания сортазы А и целевого белка

Мы применили одноступенчатую очистку для оптимизации процесса получения каркасного белка MSP1D1. Для конструирования гена, кодирующего нужный химерный белок, был выбран метод сборки по Гибсону [5].

После проведения аффинной хроматографии ее эффективность была оценена с помощью методов электрофореза, вестерн блота и гель-фильтрации. Очищенный MSP1D1 готов к использованию для сборки нанодисков. Таким образом, новый метод получения каркасного белка, представленный в данной работе, значительно ускорит и удешевит изучение GPCRs.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-14-00261.

Литература

1. *Latorraca N.R., Venkatakrishnan A.J., Dror R.O* GPCR Dynamics: Structures in Motion // *Chem. Rev.* 2017 V. 117(1), P. 139–155.
2. *Mao H.* A self-cleavable sortase fusion for one-step purification of free recombinant proteins // *Protein Expr. Purif.* 2004 V. 37(1) P. 253–263.
3. *Tsukiji S, Nagamune T.* Sortase-mediated ligation: a gift from Gram-positive bacteria to protein engineering // *ChemBioChem.* 2009 V. 10(5) P. 787–98.
4. *Jia X., Crawford T., Zhang A.H., Mobli M.* A new vector coupling ligation-independent cloning with sortase a fusion for efficient cloning and one-step purification of tag-free recombinant proteins // *Protein Expr. Purif.* 2019 V. 161 P. 1–7.
5. *Gibson D.G., Young L., Chuang R.Y., Venter J.C., Hutchison C.A. 3rd, Smith H.O.* Enzymatic assembly of DNA molecules up to several hundred kilobases // *Nat. Methods.* 2009 V. 6(5) P. 343–345.

УДК 542.06

Создание точечных мутаций для функциональных тестов липидного рецептора GPCR nrg-1

Н. С. Добрынин, Е. А. Ляпина, А. В. Мишин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рецептор, сопряженный с G-белком, nrg-1 экспрессируется во многих клетках иммунной системы и участвует в регуляции различных клеточных процессов. В частности, nrg-1 экспрессируется в НК-клетках, эозинофилах и патрулирующих моноцитах. После присоединения внеклеточного агониста рецептор передает сигналы внутрь клетки через белки G_i и G_{12/13} [1]. Ряд аминокислотных остатков рецептора играет принципиальную роль в передаче сигналов, так как от них зависит наличие и величина клеточного отклика на присоединение соответствующего лиганда [2]. Для изучения или изменения функций рецептора возможно заменять его аминокислотные остатки при помощи точечных мутаций. Чтобы оценить результат, используются функциональные тесты, конкретный вид которых зависит от сигнального пути, активируемого рецептором.

Известно, что nrg-1 связан с белками G_i и G_{12/13} [1]. Классическим сигнальным механизмом для G_i является ингибирование сАМР-зависимого пути посредством ингибирования аденилатциклазы [3]. Стимулированная аденилатциклаза может продуцировать множество молекул сАМР для усиления сигнала. сАМР действует непосредственно на несколько основных мишеней, среди которых обменный белок Ерас. При помощи данного белка будут проводиться функциональные тесты. Для этого экспрессируется Ерас-биосенсор (плазмида pVBsr-6080NES), основанный на передаче резонансной энергии флуоресценции [4].

В данной работе в ген nrg-1, клонированный в плазмиду pcDNA3.1(+), вносятся точечные мутации при помощи метода MEGAWHOP [5]. В MEGAWHOP пара комплементарных праймеров заменяют гомологичную область в матричном векторе с помощью ПЦР. После синтеза разорванной кольцевой плазмиды смесь обрабатывают *DpnI*, dam-метилированным ДНК-специфическим рестрикционным ферментом. Смесь, обработанную *DpnI*, затем вводят в клетки *Escherichia coli* Top10, чтобы получить плазмиды, несущие замененные фрагменты. Среди плазмид, полученных при помощи MEGAWHOP, практически отсутствуют образцы без замен. Полученные плазмиды используются для функциональных тестов.

Литература

1. *Bryana A.M., M. Del Poetaa* Sphingosine-1-phosphate receptors and innate immunity // *Cell Microbiol.*, 2018

2. Nelson D.L., Cox M.M. Lehninger Principles of Biochemistry., 2015, V. 1 P. 751
3. Jupe S., Akkerman J.W. G alpha (i) signalling events // <https://reactome.org>, 2007
4. Watabe T., Terai K., Sumiyama K., Matsuda M. Booster, a Red-Shifted Genetically Encoded Förster Resonance Energy Transfer (FRET) Biosensor Compatible with Cyan Fluorescent Protein/Yellow Fluorescent Protein-Based FRET Biosensors and Blue Light-Responsive Optogenetic Tools // ACS Sens. 2020
5. Miyazaki K., MEGAWHOP cloning: a method of creating random mutagenesis libraries via megaprimer PCR of whole plasmids // ScienceDirect, 2011

УДК 577.352.2

Классификация липид-ионных взаимодействий по данным малоуглового рассеяния нейтронов, денситометрии и ядерного магнитного резонанса

С.А. Куракин^{1,2}, Е.В. Ермакова¹, А.И. Иванов^{1,3,4}, Н. Кучерка^{1,5}

¹Объединенный институт ядерных исследований

²Казанский (Приволжский) федеральный университет

³Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

⁴Институт проблем безопасности атомных электростанций НАН Украины

⁵Faculty of Pharmacy, Comenius University in Bratislava

Изучение процессов связывания ионов с липидными мембранами является одной из важных задач биофизики мембран, поскольку известно, что ионы затрагивают стабильность и структуру фосфолипидных бислоев и модулируют вставку и связывание белков [1]. Липид-ионные взаимодействия определяются набором как различных внешних, так и внутренних, связанных со структурой мембраны, факторов. Здесь одним из наиболее ключевых структурных параметров является средняя латеральная площадь фосфолипида в бислое, характеризующая плотность упаковки липидов и имеющая решающее значение при оценке межмолекулярных взаимодействий, происходящих в мембранах [2].

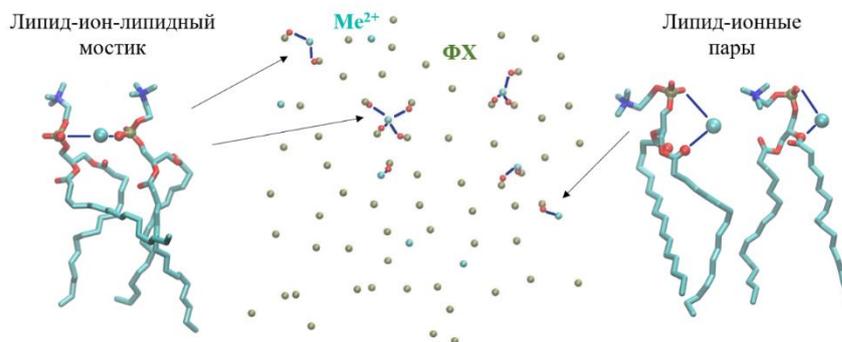


Рис. 1. Предложенные типы липид-ионных взаимодействий, реализующиеся в бислоях с различной плотностью упаковки липидов

В связи с этим в настоящей работе методами МУРН, денситометрии и спектроскопии ²Н ЯМР были исследованы структурные изменения в мембранах, составленных из цвиттер-ионных фосфолипидных бислоев различной латеральной площади (ДМФХ, ДПФХ, ПОФХ, ДОФХ) при добавлении биологически значимых катионов Ca²⁺ и Mg²⁺. На основе полученных структурных параметров этих липидных бислоев были предложены различные механизмы липид-ионных взаимодействий, которые регулируются посредством латеральной площади, т.е. плотностью упаковки мембраны [3–4]. В бислоях с плотной упаковкой фосфолипидов (ДМФХ и ДПФХ) среднее межлипидное расстояние достаточно мало, что приводит к формированию ионных мостиков липид-ион-липид, вызывающих даже дополнительное утолщение мембраны. С другой стороны, в липидном бислое с менее плотной упаковкой (ДОФХ) ионы преимущественно взаимодействуют с липидами при помощи формирования разделенных липид-ионных пар, что уменьшает толщину бислоя и повышает разупорядоченность в нем. В случае ПОФХ, среднее межлипидное расстояние в котором примерно равно длине отсечки липид-ионных взаимодействий, соответствующей латеральной площади ~ 64 Å², реализуется смешанный тип взаимодействий, при котором влияние ионных мостиков и липид-ионных пар на структуру мембраны взаимно компенсируется (рис. 1).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-72-20186.

Литература

1. *Pabst G., Kučerka N., Nieh M.-P., Rheinstädter M.C., Katsaras J.* Applications of neutron and X-ray scattering to the study of biologically relevant model membranes // *Chemistry and Physics of Lipids*. 2010. V. 163. P. 460.
2. *Kučerka N., Nieh M.-P., Katsaras J.* Fluid phase lipid areas and bilayer thicknesses of commonly used phosphatidylcholines as a function of temperature // *Biochim. Biophys. Acta*. 2011. V. 1808. P. 2761.
3. *Kučerka N., Ermakova E., Dushanov E., Kholmurodov K.T., Kurakin S., Želinská K., Uhríková D.* Cation-zwitterionic lipid interactions are affected by the lateral area per lipid // *Langmuir*. 2021. V. 37. P. 278.
4. *Kurakin S.A., Ermakova E.V., Ivankov O.I., Smerdova S.G., Kučerka N.* The Effect of Divalent Ions on the Bilayer Structure of Dimyristoylphosphatidylcholine Vesicles // *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2021. V. 15. P. 211.

УДК 577.352.27

Направленная экспрессия новых родопсинов в митохондриях: сравнение эффективности различных сигнальных последовательностей

Д.Ф. Багаева¹, А.Д. Власова¹, С.М. Бухалович¹, А.И. Куклин¹, В.И. Горделий^{1,2,3}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Institute of Complex Systems (ICS), ICS-6: Structural Biochemistry, Research Centre Jülich

³ Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS

Оптогенетика – относительно новая и перспективная технология, в которой используются генетически закодированные светочувствительные белки родопсины. Ранее этот подход широко использовался для контроля возбудимости клеточных мембран нервных клеток. Сейчас оптогенетика все чаще рассматривается как инструмент более тонкой манипуляции на субклеточном уровне.

Митохондрии играют важную роль в регуляции многих внутриклеточных процессов. Помимо выработки АТФ, митохондрии отвечают за производство активных форм кислорода, регуляцию кальциевой сигнализации и активацию гибели клетки [1]. Появление дефектов митохондриальных функций является причиной многих заболеваний, таких как диабет, сердечная недостаточность и рак [2–3]. Функциональная экспрессия родопсинов во внутренней мембране митохондрий позволит управлять мембранным потенциалом митохондрий с помощью света. Это открывает возможности для оптогенетического влияния на физиологию клетки. Различные родопсины – ионные каналы и помпы, отличаются между собой ионной селективностью, особенностями фотоцикла и потенциалом для оптогенетики.

В данной работе была проведена экспрессия нескольких представителей подсемейств родопсинов, а именно канальных родопсинов ChR2, прямых и обратных протонных помп во внутренней мембране митохондрий (ИММ) с использованием трёх сигнальных последовательностей (4хMTS (четыре повтора сигнала митохондриальной локализации из 29 аминокислотных остатков субъединицы цитохром с оксидазы COX8, ABCB10 (из белка семейства ABC-транспортёров) и Mitofilin (из белка, имеющего сигнал для доставки в межмембранное пространство)). Методом конфокальной микроскопии на клеточных линиях НЕК293Т и HeLa была исследована субклеточная локализация целевых белков. Митохондриальная локализация полученных конструкций определялась по солокализации флуоресцентной метки с доставленным в митохондрии флуоресцентным белком, степень солокализации определяли с помощью коэффициентов корреляции Пирсона и Мандерса. Также были поставлены эксперименты по определению топологии трансмембранных белков во внутренней мембране митохондрий [4]. В данной работе достигнута митохондриальная локализация родопсинов NsXeR, TARA146, Catch(ChR2(L132C)), ранее не экспрессированных в митохондриях. Полученные данные позволят расширить набор митохондриальных оптогенетических инструментов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 21-64-00018.

Литература

1. *Bohovich I., Khalimonchuk O.* Sending Out an SOS: Mitochondria as a Signaling Hub. *Frontiers in Cell and Developmental Biology*. 2016. 4 (109) 4: 109.
2. *Duchen M.R., Szabadkai G.* (2010) Roles of mitochondria in human disease // *Essays Biochem*/ 2010. **47**:115–137.
3. *Ralph S.J., Neuzil J.* Mitochondria as targets for cancer therapy// *Mol. Nutr. Food Res*. 2009. 53 (1):9–28.

4. Tkatch T. [et al.]. Optogenetic control of mitochondrial metabolism and Ca²⁺ signaling by mitochondria-targeted opsins // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2017. 114(26), E5167–E5176.

УДК 577.22

Использование высокоаффинных антител для исследований структуры GPCR-рецепторов методом криоэлектронной микроскопии

Д.А. Якубенко¹, Т.В. Котова¹, М.Б. Шевцов¹, А.В. Мишин¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Определение структур мембранных белков с высоким разрешением – одна из важнейших задач современной биологии, которая решается при помощи рентгеноструктурной кристаллографии, биомолекулярной спектроскопии ядерного магнитного резонанса, а также при помощи одночастичной криоэлектронной микроскопии (SP CryoEM). Особенно сложной проблемой считается решение структур рецепторов, сопряжённых с G-белками (GPCR) – самого большого семейства мембранных белков, которые опосредуют внутриклеточную передачу сигнала, что делает их важными терапевтическими мишенями. Так, расшифровка строения необходима для SBDD (structure-based drug design, дизайн лекарств на основе структуры).

Криоэлектронная микроскопия позволяет наблюдать нативную конформацию белков, однако существует серьёзный недостаток: определить структуры несимметричных макромолекул с высоким разрешением представляется возможным только для частиц массой более 100 кДа [1, 2], а масса большинства GPCR не превышает 50 кДа. Также мембранные белки необходимо встраивать в мицеллы детергента или нанодиски, что дополнительно затрудняет их точную ориентацию. Недавно было показано, что фрагменты антител (Fab) могут быть внесены в такие макромолекулярные системы в качестве реперных меток для упрощения ориентации и увеличения их массы [3]. Для того, чтобы исключить необходимость генерировать Fab для каждого GPCR в отдельности, необходимо создать универсальные Fab с высокой аффинностью к BRIL (апоцитохром b562), который обычно встраивают в внутриклеточную петлю-3 (ICL3) между спиралями V и VI и реже на N- и C-конце некоторых рецепторов для упрощения кристаллизации и стабилизации белка [4]. Создание антител против такого белкового фрагмента избавляет от необходимости генерировать специфичные для GPCR Fab, обеспечивая готовый материал для использования в структурных исследованиях.

На основе работы [3], вышедшей в 2020 году, в которой при помощи фагового дисплея были успешно синтезированы фрагменты антител против BRIL, был выбран Bag2 - Fab, показавший наилучший результат в cryoEM-исследованиях рецепторов и ионных каналов. На данный момент протестированы различные условия экспрессии Bag2, усовершенствован процесс очистки, увеличен выход до 25 мг с 1 л клеток, а также проанализировано образование комплекса Bag2 с рецептором со встроенным BRIL в 3 петле при помощи гель-фильтрационной хроматографии. В дальнейшем комплекс будет исследован на криоэлектронном микроскопе МФТИ с отрицательным окрашиванием для оценки связывания и ориентации и Bag2 будет использован в работе с другими мембранными белками, которые содержат BRIL на N- или C- конце.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-00337-20-03, проект FSMG-2020-0003).

Литература

1. Zorzi R., Mi W., Liao M., Walz T. Single-particle electron microscopy in the study of membrane protein structure // Microscopy. 2016. V. 65. P. 81–96.
2. Wu S. [et al.]. Fabs enable single particle cryoEM studies of small proteins // Structure. 2012. V. 20. P. 582–592.
3. Mukherjee, S., Erramilli S., Ammirati M. [et al.] Synthetic antibodies against BRIL as universal fiducial marks for single-particle cryoEM structure determination of membrane proteins // Nature Communications. 2020.
4. Chun E. [et al.]. . Fusion partner toolchest for the stabilization and crystallization of G protein-coupled receptors // Structure. 2012. V. 20. P. 967– 976.

Создание палитры генетически кодируемых флуоресцентных меток для микроскопии в анаэробных условиях

А.С. Николаев, А.Н. Юденко, И.Ю. Гуцин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Целью работы было создание на основе флавин-связывающего белка из семейства LOV-доменов как можно большего числа белков с значительно отличающимися спектрами флуоресценции. Такая палитра может быть применена для многоцветной флуоресцентной микроскопии анаэробных организмов и других оптогенетических приложений. Попытка создания аналогичной палитры предпринималась ранее [1], что привело к появлению двухцветной палитры, с доказанной применимостью в микроскопии. В данной работе описан метод получения палитры с большим числом белков.

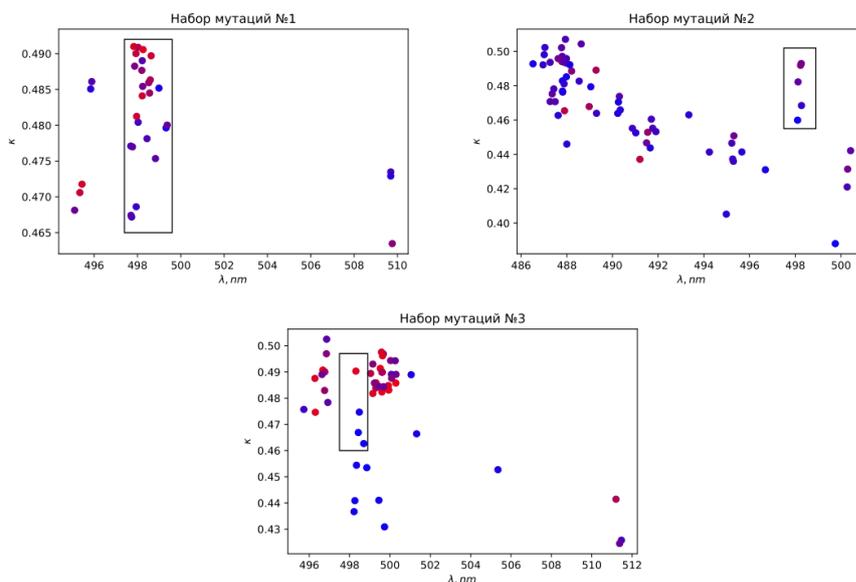


Рис. 1. Пример $\lambda - \kappa$ диаграмм для трех серий мутагенеза. По горизонтальной оси отложена λ -положение максимума спектра флуоресценции; по вертикальной κ – отношение амплитуды второго по величине пика к первому. Чем краснее точка, тем выше интенсивность ее спектра (и достоверность ее параметров). Внутренней черной рамкой обведены спектры, вероятно относящиеся к исходному белку и/или имеющие подобные ему спектры и поэтому не представляющие интереса для дальнейшего исследования

В основе метода лежал точечный случайный мутагенез белка CagFBFP, известного своей термо- и рН-стабильностью [2]. Для получения каждого набора вариантов мутировалась одна из аминокислот, находящихся в непосредственной близости от флуорофора – молекулы флавинмононуклеотида. Отбор вариантов с измененными спектрами флуоресценции осуществлялся путем сканирования спектров большого числа колоний *E. coli* C41(DE3), экспрессировавших библиотеку вариантов CagFBFP, с последующим компьютерным анализом полученного набора спектров с целью выявления наибольших девиаций.

Для анализа спектров был разработан метод, названный « $\lambda - \kappa$ диаграмма». На первом этапе метода для каждого спектра строится аппроксимация, с использованием суммы четырех функций плотности вероятности для скошенного нормального распределения (англ. skew normal distribution). Такие аппроксимации приближали спектр с точностью до погрешности прибора. На втором этапе метода они использовались для определения длины волны максимума спектра флуоресценции, λ ; а также параметра κ – отношения амплитуды второго по величине пика к амплитуде первого. На основании этих данных строились $\lambda - \kappa$ диаграммы (рис. 1)

Как видно из приведенных диаграмм, наблюдалось большое количество мутантов исходного белка, имеющих существенные сдвиги максимумов и искривление формы спектра. Полученные белки подходят на роль флуоресцентных меток для многоцветной микроскопии анаэробных организмов.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда, грант № 21-64-00018.

Литература

1. Röllén K. [et al.]. The molecular basis of spectral tuning in blue- and red-shifted flavin-binding fluorescent proteins // Journal of Biological Chemistry. 2021. T. 296.
2. Nazarenko V. V. [et al.]. A thermostable flavin-based fluorescent protein from *Chloroflexus aggregans*: a framework for ultra-high resolution structural studies // Photochem. Photobiol. Sci. 2019. T. 18, № 7. C. 1793–1805.

УДК 577.322

Virtual screening of G-protein coupled receptors in structure-based drug design pipeline

M. Kovaleva¹, E. Marin^{1,3}, E. Lyapina¹, A. Gusach¹, A. Mishin¹,
A. Rogachev¹, V. Cherezov^{1,2}, V. Borshchevskiy¹

¹Research Center for Molecular Mechanisms of Aging and Age-related Diseases,
Moscow Institute of Physics and Technology

²Bridge Institute, Department of Chemistry, University of Southern California, Los Angeles, California,
USA

³Groningen Biomolecular Sciences and Biotechnology Institute, University of Groningen

G-protein coupled receptors (GPCRs) are the largest class of membrane proteins. They are also the subject of drug discovery research because of their significant role in sustaining normal physiological activity [1]. Therefore, high-affinity ligands to GPCRs are in great demand nowadays.

In order to find therapeutic agents for a target, a drug discovery pipeline should be implemented. To date, high-throughput screening has been the main method to search for initial hits, or *lead compounds*, in a drug discovery campaign. Due to its purely experimental nature and low percentage of lead compounds in chemical space, it is known to be an expensive and time-consuming procedure [2]. To cover a larger part of chemical space and avoid extremely high costs, virtual screening (VS) is often used nowadays prior to or instead of high-throughput screening. A structure-based VS requires the 3D structure of a target, which is then tested *in silico* for its ability to bind molecules from a large chemical library. Luckily, in recent years, the number of obtained structures of GPCRs has been quickly increasing [3], which allows for the application of structure-based drug design and the structure-based virtual screening as a part of it.

Virtual screening is a ranking algorithm, which sorts compounds in the library according to the probability of that compound being active. After VS, only a small portion of the large library (VS ‘hits’) is to be picked for further experimental investigation. Thus, the success of experimental testing and subsequent steps strongly depends on the quality of virtual screening. Before running a VS on a large dataset, one should determine which parameters are the best for the assigned task. That requires an assessment of the quality of the VS with various parameters on a library containing already known active compounds. Besides, metrics to evaluate the performance of VS must be chosen carefully: many metrics used to evaluate the performance of ranking methods, like ROC or AUAC, are inapplicable to virtual screening [4] due to high imbalance in the dataset.

The aim of the current work is to identify the selective ligands for the target of interest – a class A lipid GPCR, a structure of which has not been published yet. Here, the results of the benchmark aimed to search for the best VS strategy are reported. Now, the best-performing strategy can be applied to the virtual screening of a large-scale library.

References

1. Blass B.E. Basic Principles of Drug Discovery and Development. Academic Press, 2015.
2. McInnes C. Virtual screening strategies in drug discovery // Curr. Opin. Chem. Biol. 2007 V. 11(5). P. 494–502.
3. Pándy-Szekeres G. et al. The G protein database, GproteinDb // Nucleic Acids Res. 2021.
4. Truchon J., Bayly C.I. Evaluating Virtual Screening Methods: Good and Bad Metrics for the «Early Recognition» Problem // J. Chem. Inf. Model. 2007. V. 47(2). P. 488–508.

Применение оптогенетической системы защелачивания лизосом для регулирования биологических процессов в клетке

*А.В. Мельников¹, В.А. Борисов¹, Н.С. Ильинский¹, Ф.М. Цыбров¹, С.М. Бухалович¹,
А.Д. Власова¹, В.И. Горделий^{1,2,3}.*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Institute of Complex Systems (ICS), ICS-6: Structural Biochemistry, Research Centre Jülich

³Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS

Правильное функционирование лизосом в клетке зависит от поддержания их кислотности (рН). При старении организма лизосомы постепенно теряют способность закисляться, что приводит к нарушению аутофагии и к различным нейродегенеративным расстройствам [1]. С другой стороны, опухолевые клетки характеризуются повышенной кислотностью лизосом [2]. Это обеспечивает повышенную активность катепсинов. Заболевания, опосредованные катепсином, включают болезнь Альцгеймера; многочисленные виды рака; аутоиммунные заболевания, такие как артрит; ускоренное разрушение костной структуры, наблюдаемое при остеопорозе. Повышенная активность катепсина-В и -L была связана с несколькими типами рака [3–4].

Одним из самых распространенных методов защелачивания лизосом для моделирования патологического состояния, ведущего к нейродегенерации, является ингибирование вакуолярной АТФазы с помощью антибиотика бафиломицина А1 (BafA1). При связывании с комплексом V-АТФазы BafA1 ингибирует транслокацию H^+ , тем самым лишая кислые внутриклеточные компартменты (т.е. эндосомы, лизосомы и везикулы) ионов H^+ , повышая их рН и ингибируя функцию резидентных гидролаз. С другой стороны, это вызывает накопление H^+ в цитоплазме обработанных клеток, что приводит к ацидозу и, таким образом, может вызывать вторичные побочные эффекты в нормальных клетках [5]. Химический метод защелачивания лизосом имеет недостатки, поскольку требует времени для проникновения BafA1 в клетку, не даёт исследовать эффекты частичного защелачивания лизосом клетки.

В представленной работе были проведены эксперименты оптогенетического защелачивания лизосом в трансфицированных плазмидой (с геном NsXeR (протонная помпа) родопсина с флуоресцентными белками-репортёрами pHluorin и mKate2) клетках НЕК293Т. В них на микроскопе было зафиксировано защелачивание лизосом, определяемое по уровню флуоресценции белка pHluorin [6]. Работа родопсина активировалась путем воздействия светодиодным освещением на длине волны 590 нм.

В результате проведения экспериментов удалось добиться стабильной работы родопсина, то есть повторяемый высокий уровень экспрессии белка в лизосомах, повторяемый эффект защелачивания при освещении. Также впервые были проведены контрольные эксперименты, подтверждающие, что без работы родопсина эффект защелачивания не наблюдается. Теперь требуется проверить активность ферментов лизосом (катепсинов) с помощью флуоресцентных субстратов типа magic RED [7]. Если защелачивание с помощью родопсина существенно, освещение инактивирует фермент катепсин. Также планируется провести эксперимент с использованием метки LysoSensor Yellow-Blue для проверки объемного рН. Краситель LysoSensor поглощается клеткой и производит синюю флуоресценцию в нейтральной среде, но меняется на желтую флуоресценцию в более кислой среде.

В результате достижения устойчивого и заметного защелачивания лизосом возможно снижение повышенной активности катепсинов в раковой клетке и её способности к инвазии.

Литература

1. Wyss-Coray, T. Ageing, neurodegeneration and brain rejuvenation // *Nature*. 2016. Т. 539. № 7628. С. 180–186.
2. Tang T. [et al.]. The role of lysosomes in cancer development and progression. *Cell Biosci* 10, 131 (2020).
3. Buhlin F. [et al.]. Review: novel cysteine proteases of the papain family. *Adv Exp Med Biol* 477, 241–254, doi:10.1007/0-306-46826-3_26 (2000).
4. Gerbe, A., Welte, T., Ansonge, S., Buhling, F. Expression of cathepsins B and L in human lung epithelial cells is regulated by cytokines. *Adv Exp Med Biol* 477, 287–292, doi:10.1007/0-306-46826-3_31 (2000).
5. Yan, Y. [et al.]. Bafilomycin A1 induces caspase-independent cell death in hepatocellular carcinoma cells via targeting of autophagy and MAPK pathways // *Sci Rep*. 2016. 6, 37052.
6. Sankaranarayanan S. [et al.]. The use of pHluorins for optical measurements of presynaptic activity // *Biophysical journal*. 2000. V. 79. № 4. P. 2199–2208.
7. *ImmunoChemistry Technologies*, Magic Red®Cathepsin Assay Manual.

Circular permutation of thermostable flavin-based fluorescent protein from *Chloroflexus aggregans**Iakov Kaiumov, Anna Yudenko, Ivan Gushchin*

Recently developed flavin-based fluorescent protein CagFbFP, derived from the thermophilic bacterium *Chloroflexus aggregans*, is a promising molecule for optogenetics [1]. Despite all its positive qualities, such as thermostability, small size and ability to fluoresce under anaerobic conditions, it is also known that this protein is a dimer, which can be a problem to many optogenetic applications. Herein, we report a set of circularly permuted CagFbFP LOV domains (permLOVs). We assembled permLOV genes, performed expression in *E. coli* cells and demonstrated that all variants retained fluorescent activity, while losing slightly in thermostability.

Based on the three-dimensional structure of CagFbFP (PDB entry 6RHF), we found that N and C termini are closely positioned with a distance of less than 15 Å. Using simulations, we analyzed linkers consisting of 6 and 7 amino acids. While both seemed to work well, we decided that a linker of length 7 provides more flexibility, which means that the loop definitely should not be strained, and should not interfere with assembly of the protein core. Cut site, which is the position of the new N and C termini, had to be chosen in those regions that have little effect on protein folding. Such non-conserved regions were previously found using multiple sequence alignment [2]. Similarly, in this project we have chosen positions A58, P91 and E137 as cut sites, because of their diminished influence on protein stability (Fig. 1A).

To build plasmids encoding permLOV(58,91,137)-ins7 we used two-step PCR technique. In the first step, plasmid pET-caLOV, which encodes full CagFbFP gene, is used to build a megaprimer encoding parts (59,92,138)-153 with overhang sequences that will be annealed on the plasmids encoding CagFbFP 48-(58,91,137) parts. Overhang on reverse primer also includes the linker sequence. This step is performed using PCR, followed by agarose gel electrophoreses and DNA extraction. In the second step we use previously build megaprimer and pSUMO-LOV to perform circular PCR that results in amplification of the final permLOV plasmid. It is then followed by cleavage of methylated template DNA using DpnI restriction enzyme and transformation of DH10β *E. coli* competent cells.

All constructs expressed well in C41(DE3) *E. coli* cells and were purified using Ni-NTA affinity chromatography. However, expression level of permLOV58-ins5 was much higher than of the other constructs. Fluorescence excitation and emission spectra were obtained and analyzed. It turned out that permLOV58 has similar spectrum shape as original CagFbFP, while the other two constructs have a left and right peak ratio significantly different from the original protein (Fig. 1B).

Denaturation temperatures of all variants were obtained by analyzing denaturation and renaturation curves. Results are shown in Fig. 1C. permLOV137 showed the same melting temperature as original CagFbFP, while two other proteins turned out to be less thermostable. However, permLOV58 showed fast kinetics on renaturation, while permLOV137 almost lost the ability to renature. Based on the expression level, spectral analysis and thermal stability, permLOV58-ins7 was recognized as the most successful and selected as the target protein for testing linkers of lengths 5 and 6.

In conclusion, we assembled 3 permuted variants of flavin-based fluorescent protein CagFbFP and demonstrated that such permutations are fundamentally possible and the resulting proteins have sufficient stability for full-fledged activity.

This work was supported by the Russian Science Foundation (RSF) Project 21-64-00018.

Literature

1. Nazarenko V. V. [et al.]. A thermostable flavin-based fluorescent protein from *Chloroflexus aggregans*: a framework for ultra-high resolution structural studies // Photochem. Photobiol. Sci. The Royal Society of Chemistry, 2019. V. 18, № 7. P. 1793–1805.
2. Yudenko A. [et al.]. Rational Design of a Split Flavin-Based Fluorescent Reporter // ACS Synth. Biol. American Chemical Society, 2021. V. 10, № 1. P. 72–83.

Характеризация липидных кубических фаз в условиях меняющейся влажности

*С.Д. Иващенко^{1,2}, Е.О. Шапаренко¹, А.В. Власов^{1,3},
А.С. Казанцев¹, Ю.Л. Рижиков^{1,3}, А.И. Куклин^{1,3}, В.И. Горделий^{1,4,5,6}*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт биологии гена РАН

³Объединенный институт ядерных исследований

⁴Institute of Biological Information Processing (IBI-7: Structural Biochemistry), Forschungszentrum Jülich

⁵JuStruct: Jülich Center for Structural Biology, Forschungszentrum Jülich

⁶Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS

Изучение структур мембранных белков методом малоуглового рентгеновского рассеяния является перспективным направлением структурной биологии [1]. Кристаллизация мембранных белков происходит в липидных кубических фазах (LCP) – фазовом состоянии водных растворов липида моноолеина при определённом соотношении компонентов и температуре [2]. Кристаллизация некоторых мембранных белков в мезофазах (in meso) может занимать несколько месяцев, поэтому важным фактором является скорость испарения окружения мезофазы (преципитата) в кристаллизационной пробе.

Fig. 1 (A) Secondary structure diagram with selected cut locations [1]. (B) Fluorescence emission spectra of CagFbFP and permLOV constructs. Emission was measured between 470 and 700 nm in increments of 1 nm, with excitation fixed at 450 nm. (C) Melting temperatures of the original CagFbFP and permuted variants. For each protein two denaturation transitions were observed with melting temperatures T_{m1} and T_{m2}

В работе исследуется скорость испарения преципитата в кристаллизационных пробах и пропускания рентгеновского излучения при использовании кристаллизационных плашек из покровного стекла и пластика (циклоолефин кополимера, СОС). Проведена характеристика липидных кубических фаз моноолеина, помещённых в преципитаты из коммерческого набора QSP1 в стеклянной (толщина одного стекла 160 мкм, на одну плашку используется два стекла) и пластиковой кристаллизационных плашках. Изображения образовавшихся липидных кубических фаз в разные периоды времени были получены с помощью микроскопа, после чего обработаны в программе ImageJ. Площадь капель определена в сравнении с шаблоном известного размера. Проведена характеристика липидных кубических фаз в растворах NaКРi, с различными соотношениями $\text{NaH}_2\text{PO}_4/\text{K}_2\text{HPO}_4$ и различными рН (статистическая выборка – 4 одинаковых кристаллизационных пробы в стеклянной и пластиковой кристаллизационных плашках). Пропускная способность стеклянной и пластиковой кристаллизационных плашек определялись на установке малоуглового рентгеновского рассеяния Rigaku (МФТИ) [3].

Обнаружены заметные уменьшения объёма капель в кристаллизационных плашках из пластика в сравнении с плашками из стёкол. Подтверждена возможность характеристики липидных кубических фаз в стеклянных плашках (толщина стекла 160 мкм) методом малоуглового рентгеновского рассеяния на источнике Rigaku (МФТИ), при этом пропускание рентгеновского пучка составляет ~ 4%, что оказалось достаточным для классификации типа симметрии липидных кубических фаз и определения их параметров решетки.

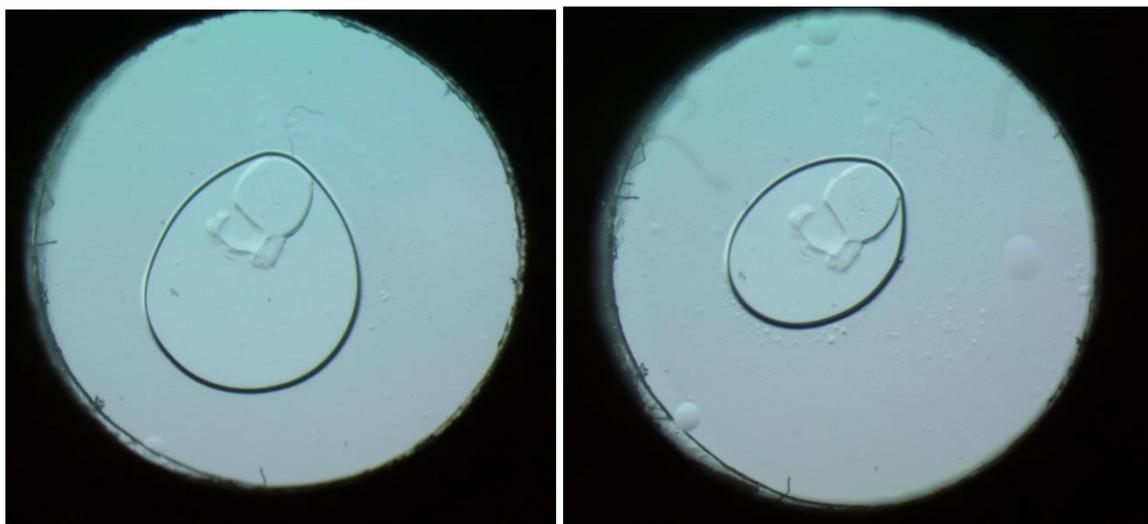


Рис. 1. Фотографии одной и той же кристаллизационной пробы в пластиковой пластке с разницей в 8 дней

Литература

1. Joseph J.S., Liu W., Kunken J., Weiss T.M., Tsuruta H., Cherezov V. Characterization of lipid matrices for membrane protein crystallization by high-throughput small angle X-ray scattering // *Methods*. 2011. V. 55(4). P. 342–349.
2. Caffrey M., Cherezov V. Crystallizing membrane proteins using lipidic mesophases // *Nature Protocols*. 2009. V. 4(5). P. 706–731.
3. Murugova T.N., Vlasov A.V., Ivankov O.I., Rogachev A.V., Ryzhykau Y.L., Soloviov D.V., Zhigunov A., Zinovev E.V., Kovalev Y.S., Round A., Gordeliy V. I., Kuklin A.I. Low resolution structural studies of apoferritin via SANS and SAXS: the effect of concentration // *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*. 2015. V. 17 (9–10). P. 1397–1402.

УДК: 577.322.2

Антирестрикционная активность ArdB против EcoR124II

А.М. Лисаченко, А.А. Кудрявцева, И.В. Манухов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящей работе изучена антирестрикционная активность белка ArdB против системы рестрикции-модификации (RM-системы) EcoR124II, относящейся к рестриктазам I типа и входящей в семейство IC. В настоящее время известно, что белки семейства ArdB могут ингибировать работу рестриктаз EcoKI семейства IA [1]. Мы показали, что, несмотря на ранее известное ингибирование EcoKI, ArdB не оказывает влияние на эндонуклеазную активность EcoR124II.

Плазмидами, представленными в табл. 1, была проведена трансформация клеток *Escherichia coli* TG1 (r-m-) и AB1157 (r+m+, содержит RM-систему EcoKI) кальциевым методом согласно методике [2]. Для измерения антирестрикционной активности белка ArdB (pTZ) в полученных штаммах была применена фаговая методика измерения активности, описанная в [3]. Эффективность посева (EOP – efficiency of plating) фага λ_0 определяли как соотношение титра фага на соответствующем штамме и на штамме TG1 pKF650 (r+m+, содержит RM-систему EcoR124II). Результаты представлены в табл. 2.

Таблица 1. Штаммы и плазмиды, использованные в ходе работы

Плазмида	Описание	Примечание
pKF650	Вектор pACYC18, содержащий гены, определяющие экспрессию комплекса EcoR124II, вставленные по сайтам HindIII и BamHI	Любезно предоставлены чешскими коллегами из центра нанобиологии и структурной биологии Чешской академии наук (Centrum Nanobiologie a
pACMS	Как pKF650, но без генов, определяющих синтез R-субъединиц EcoR124II	

		Strukturní Biologie Mikrobiologického Ústavu Akademie Věd České Republiky)
pTZ-ArdB	Вектор pTZ57R, содержащий ген <i>ardB</i> из R64 под P _{lac} промотором	Получена в работе [4]
pGEX-ArdB	Экспрессионный вектор pGEX-KG с P _{lac} промотором и последовательностью глутатионтрансферазы (GST), определяющий синтез белка ArdB, сшитого с GST	Получена в работе [5]
pUC-ArdA	Вектор pUC18, содержащий ген <i>ardA</i> из R64 под P _{lac} промотором	Любезно предоставлена коллегами из института «ГосНИИгенетика»

Таблица 2. Данные посевов фага λ_0 на клетки E. Coli

Штамм	Комментарий	ЕОР фага
TG1	r-m-	10^5
TG1 pACMS	EcoR124II r-m+	10^5
TG1 pKF650	EcoR124II r+m+	1
TG1 pKF650 pTZ-ArdB	EcoR124II r+m+, ArdB	1
TG1 pKF650 pGEX-ArdB	EcoR124II r+m+, ArdB	1
TG1 pKF650 pUC-ArdA	EcoR124II r+m+, ArdA	10^3
AB1157	EcoKI r+m+	1
AB1157 pTZ-ArdB	EcoKI r+m+, ArdB	10^4
AB1157 pUC-ArdA	EcoKI r+m+, ArdA	10^5

Таким образом, показано, что RM-система EcoR124II приводит к ухудшению посева фага λ_0 примерно в 10^5 раз, в то время как EcoKI дает результат порядка 10^4 . Это можно объяснить различным количеством сайтов узнавания в геноме фага λ_0 – 14 для EcoR124II и 5 для EcoKI.

Также установлено, что антирестриктаза ArdA улучшает эффективность посева фага на клетки, содержащие EcoR124II (pKF650), на 3 порядка. В этом случае не происходит полного ингибирования рестриктазы, в отличие от аналогичного эксперимента с EcoKI (AB1157) (табл. 2).

В результате исследования не было выявлено антирестрикционной активности белка ArdB против RM-системы EcoR 124II *in vivo*. Это может быть связано как с отсутствием этой активности, так и с недостаточным количеством ArdB, экспрессируемого с плазмид pTZ-ArdB и pGEX-ArdB. Ранее активность ArdB изучалась против EcoKI, гены которой содержались в бактериальной хромосоме *E. coli* AB1157, и поэтому экспрессия ArdB была достаточной для ингибирования. В пользу гипотезы о концентрационной зависимости ингибирования EcoR124II (pKF650) свидетельствует тот факт, что более активный белок ArdA ингибирует ее лишь частично (табл. 2), несмотря на полное ингибирование им EcoKI (AB1157). В дальнейшем планируется использовать конструкции, позволяющие увеличить количество ArdB в клетке, а также клонировать ген EcoKI в вектор pACYC18 для проверки этой гипотезы и сравнения двух RM-систем в одинаковых условиях.

Литература

1. Belogurov, A.A., Delver, E.P., & Rodzevich, O.V. (1992). IncN plasmid pKM101 and IncI1 plasmid ColIb-P9 encode homologous antirestriction proteins in their leading regions // Journal of Bacteriology, 174(15), 5079–5085. [https://doi.org/10.1128/jb.174.15.5079–5085.1992](https://doi.org/10.1128/jb.174.15.5079-5085.1992).
2. Маниатис Т., Фрич Э., Сэмбрук Дж. Молекулярное клонирование. Москва изд-во Мир 1984 г. с. 480.
3. Zavil'gel'skii, G.B., et al. Weakening of bacteriophage lambda EcoK DNA restriction in the presence of plasmid pKM101 ard+. I. General characteristics and genetic localization // Mol Biol (Mosk), 1984. 18(6): P. 1590–6.
4. Кудрявцева А.А., Осетрова М.С., Ливинюк В.Я., Манухов И.В., Завильгельский Г.Б. С-концевой остаток аспарагиновой кислоты (D141) необходим для антирестрикционной активности белка ArdB (R64) // 2017 Молекулярная биология. 51(5): 831–835.
5. Balabanov V. P., Kudryavtseva A.A, Melkina O.E, Pustovoit K.S, Khrulnova S.A, Zavilgelsky G.B. 2019. ArdB Protective Activity for Unmodified λ Phage Against EcoKI Restriction Decreases in UV-Treated Escherichia Coli. Current Microbiology 76(11):1374–78.

Построение иммунного профиля CD4+ Т клеток по данным цитометрии крови

М.Д. Воронина¹, Р.И. Атауллаханов²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

CD4+ Т-клетки (Т-хелперы) составляют второе звено адаптивного Т-клеточного иммунитета наряду с их сестринской линией CD8+ цитотоксических Т-клеток. Существует большое разнообразие функций Т-хелперов, которые зависят от состояния дифференцировки и созревания [1].

Проточная цитофлуориметрия является широко используемым аналитическим методом для идентификации и характеристики различных клеточных подтипов. Анализ данных трех-четырёх параметрической иммунофлуоресценции не вызывает затруднений, но он становится значительно более сложным при исследовании увеличивающегося количества клеточных маркеров, что приводит к увеличению вариабельности и проблемам воспроизводимости [2].

В данной работе был усовершенствован подход к многопараметрическому типированию CD4+ Т клеток периферической крови, охватывающий более 40 различных фенотипов, описываемых поверхностными маркерами, включающими хемокиновые рецепторы. Методами машинного обучения показана возможность автоматизации процесса разметки образцов.

Разработанная стратегия типирования была использована в анализе 6 функциональных подтипов CD4+ Т клеток, опосредующих противоопухолевый иммунитет [3–5], у когорты здоровых доноров и онкологических больных. По результатам проведенных *t*-тестов с поправкой на множественное сравнение было выявлено статистически значимое снижение численности популяции Effector Memory Th17 у онкологических больных, что показывает перспективность данного метода для диагностики

Литература

1. Tay R.E., Richardson E.K., Toh H.C. Revisiting the role of CD4+ T cells in cancer immunotherapy—new insights into old paradigms // *Cancer Gene Therapy*. Springer Nature. 2021. V. 28. P. 5.
2. Cheung M., Campbell J.J., Whitby L., Thomas R.J., Braybrook J., Petzing J. Current trends in flow cytometry automated data analysis software // *Cytometry Part A*. Wiley-Liss Inc. 2021. V. 99. P. 1007.
3. Ohue Y, Nishikawa H. Regulatory T (Treg) cells in cancer: Can Treg cells be a new therapeutic target? // *Cancer Science*. Blackwell Publishing Ltd. 2019. V. 110. P. 2080.
4. Chen C, Gao F.H. Th17 cells paradoxical roles in melanoma and potential application in immunotherapy // *Front Immunol*. 2019. V. 10. P. 187.
5. Xu H.M. Th1 cytokine-based immunotherapy for cancer // *Hepatobiliary Pancreat Dis Int*. 2014. V. 13. P. 482.

Сравнение основных характеристик lux-биосенсоров на основе *Bacillus subtilis* и биосенсоров на основе *Escherichia coli*

У. С. Новоятлова¹, А.Г. Кесених¹, И.В. Манухов¹

¹Московский Физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

На данный момент есть два подхода к исследованиям химических соединений на токсичность с помощью люминесцирующих бактерий: наблюдение за снижением уровня общей люминесценции [1] или наблюдение за индукцией люминесценции [2–5]. Стресс-индуцируемые lux-биосенсоры на основе *Escherichia coli* используются в различных исследованиях по токсичности, например, по исследованию токсичности ракетного топлива и его перспективных компонентов [6]. Также их используют для экологического мониторинга, но для исследования почв биосенсоры на основе грамотрицательных бактерий мало эффективны [7]. Разработка lux-биосенсоров на основе грамположительных бактерий *Bacillus subtilis* способствует более полному анализу механизмов токсичности биологически активных веществ, которые специфически взаимодействуют с грамположительными бактериями, или экологическому мониторингу загрязнений почв. Нами сконструированы биосенсоры на основе *B. subtilis* 168, селективно реагирующие на SOS-ответ, окислительный стресс и алкилирование ДНК [8].

В настоящей работе проведено сравнение данных биосенсоров с подобными биосенсорами на основе *E. coli*, а именно, сравнение их основных характеристик – чувствительности, амплитуды ответа и времени ответа.

Попарно для сравнения брали следующие биосенсорные плазмиды в *B. subtilis* и *E. coli*: pNKdinC и pDinI для детекции SOS-ответа, pNKmrgA и pDpS для определения окислительного стресса и pNKalkA и pAlkA для определения алкилирования ДНК.

На биосенсорах *B. subtilis* 168 pNKdinC и *E. coli* pDinI было исследовано вещество ВВН (2,2'-bis(bicyclo[2.2.1] heptane)) – перспективный компонент ракетного топлива. В *E. coli* нет прямого гомолога гену *dinC*, поэтому сравнение проводилось с биосенсором, содержащим промотор к гену *dinI*, который так же как и P_{dinC} индуцируется в ответ на повреждение ДНК. Было показано, что ВВН индуцирует SOS-ответ и в грамотрицательных, и в грамположительных бактериях. По полученным результатам можно судить о том, что чувствительность биосенсора *B. subtilis* 168 pNKdinC на порядок выше, амплитуда ответа в 3 раза больше, а по времени ответа он уступает примерно в 2 раза.

С помощью биосенсоров *B. subtilis* 168 pNKmrgA и *E. coli* pDpS так же было исследовано вещество ВВН. Белок *E. coli* DpS – прямой гомолог белку MrgA в *B. subtilis* 168. Было показано, что вещество ВВН индуцирует окислительный стресс в грамотрицательных и грамположительных бактериях. По данным результатам чувствительность биосенсора *B. subtilis* 168 pNKmrgA примерно на порядок выше, чем чувствительность *E. coli* pDpS, время ответа и амплитуда ответа примерно одинаковы.

В дальнейшем планируется провести подробное сравнение штаммов *B. subtilis* 168 pNKalkA и *E. coli* MG1655 pAlkA с использованием алкилирующих агентов.

Таким образом, было проведено сравнение стресс-индуцируемых lux-биосенсоров на основе *B. subtilis* и *E. coli*. Было показано, что биосенсоры *B. subtilis* pNKmrgA и pNKdinC превосходят в чувствительности *E. coli* pDpS и pDinI при измерениях с веществом ВВН, что говорит об их преимуществе в исследованиях токсичности. Таким образом, использование комплекса lux-биосенсоров на основе *B. subtilis* и *E. coli* можно делать более полный сравнительный анализ воздействия токсикантов на грамположительные и грамотрицательные бактерии.

Литература

1. Gnuchikh E., Baranova A., Schukina V., Khaliullin I., Zavilgelsky G., Manukhov I. Kinetics of the thermal inactivation and the refolding of bacterial luciferases in Bacillus subtilis and in Escherichia coli differ // PLoS One, V. 14, N 12, P. 1–11, 2019, doi: 10.1371/journal.pone.0226576.
2. Zavilgelsky G.B., Kotova V. Y., Manukhov I.V., Titanium dioxide (TiO₂) nanoparticles induce bacterial stress response detectable by specific lux biosensors // Nanotechnologies Russ., V. 6, N 5, P. 401–406, 2011, doi: 10.1134/S1995078011030165.
3. Abilev S.K., Kotova V. Y., Smirnova S.V., Shapiro T.N., Zavilgelsky G.B., Specific Lux Biosensors of Escherichia coli Containing pRecA::lux, pColD::lux, and pDinI::lux Plasmids for Detection of Genotoxic Agents // Russ. J. Genet., V. 56, N 6, P. 666–673, 2020, doi: 10.1134/S1022795420060022.
4. Zavilgelsky G.B., Kotova V. Y., Manukhov I.V. Action of 1, 1-dimethylhydrazine on bacterial cells is determined by hydrogen peroxide // V. 634, P. 172–176, 2007, doi: 10.1016/j.mrgentox.2007.07.012.
5. Kotova V. Y., Manukhov I.V., Zavilgelskii G.B. Lux-biosensors for detection of SOS-response, heat shock, and oxidative stress // Appl. Biochem. Microbiol., V. 46, N 8, P. 781–788, 2010, doi: 10.1134/S0003683810080089.
6. Kessenikh A. et al. Genotoxic effect of 2,2'-bis(bicyclo[2.2.1] heptane) on bacterial cells // PLoS One, V. 15, N 8 August 2020, P. 1–11, 2020, doi: 10.1371/journal.pone.0228525.
7. Манухов И.В., Балабанов В.П., Котова В.Ю., Хрульнова С.А., Мелькина О.Е., Крайнов А.А., Пустовойт К.С., Кречетов П.П., Королева Т.В., Шатров Т.Я., Чалкин С.Ф. Использование lux-биосенсоров для детекции НДМГ в почве // Двойные технологии, V. 3, N 44, 2008.
8. Kessenikh A.G. et al. Constructing of bacillus subtilis-based lux-biosensors with the use of stress-inducible promoters // Int. J. Mol. Sci., V. 22, N 17, P. 1–13, 2021, doi: 10.3390/ijms22179571.

Исследование динамики белковых гранул в человеческих клетках и *in vitro*

**В.А. Борисов¹, А.В. Мельников¹, А.С. Фефилова^{1,2}, К.К. Туроверов^{1,2},
И.М. Кузнецова^{1,2}, Н.С. Ильинский¹, А.В. Фонин^{1,2}, В.Н. Уверский^{1,3}**

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²НИИ Цитологии РАН

³The University of South Florida (Tampa, Florida, USA)

Белковые гранулы – немембранные органеллы клетки, состоящие из белков и РНК, формирующиеся для выполнения каталитической, сигнальной и защитной функций. Белковые гранулы, появляющиеся в состоянии стресса, известны как стресс-гранулы (СГ). Предполагаемыми функциями СГ являются защита РНК от вредных воздействий [1], а также приостановка трансляции при воздействии стресса [2]. Формирование СГ происходит посредством фазового перехода жидкость-жидкость, и СГ представляют собой жидкие капли [3]. Последние исследования показывают, что такие фазовые переходы чрезвычайно чувствительны к изменениям физико-химических параметров клетки [4]. В настоящее время показано, что сборка и динамика СГ модулируется АТФ [5]. Целью данной работы является сравнение динамики СГ в клетках при различных условиях и моделирование сборки гранул выделенного каркасного белка СГ *in vitro* [6].

Общепринятым подходом для наблюдения структуры и динамики СГ является метод восстановления интенсивности флуоресценции после выжигания (англ. Fluorescence Recovery after Photo-bleaching, абб. FRAP) [7]. Сутью этого метода является выжигание лазером части конденсата, содержащего флуоресцентный белок, и получение зависимости восстановления интенсивности флуоресценции от времени после выжигания $I(t)$. Основными параметрами динамики СГ, получаемыми методом FRAP при аппроксимации $I(t)$ двумя экспонентами, являются проценты быстрой и медленной мобильных фракций F_1 и F_2 , процент немобильной фракции F_i , а также времена восстановления $t_{1/2}$. К примеру, FRAP-анализ применялся для сравнения динамики СГ при удалении АТФ, и при его наличии, и было показано, что время восстановления СГ и процент немобильной фракции F_i при удалении АТФ увеличивались, что свидетельствует об ухудшении динамики СГ [5].

В данной работе проведены эксперименты по FRAP СГ в HDF клетках с удалением АТФ и без. Клетки были трансфицированы плазмидой, содержащей ген каркасного белка СГ, соединенного линкером с GFP, интенсивность флуоресценции которого измерялась в экспериментах по FRAP. Стресс индуцировался воздействием 0,5 М арсенита натрия в течение двух часов [8]. Удаление АТФ вызывалось воздействием азида натрия и 2-деоксиглюкозой [5]. Также *in vitro* были получены гранулы при смешивании выделенного каркасного белка с краудинг-агентом Ficoll 400, для детекции по флуоресценции был добавлен белок, связанный с флуоресцентной меткой Су3, и был проведен FRAP-анализ гранул.

Результаты наших исследований показали, что в HDF клетках наблюдались эффекты, схожие с опубликованным в литературе [5], то есть количество быстрой мобильной фракции F_1 при удалении АТФ уменьшалось (55% против 70%), однако время восстановления $t_{1/2}$ для F_1 также уменьшалось (10 с против 19 с), количество медленной мобильной фракции F_2 существенно не изменилось (~10%), а количество немобильной фракции F_i увеличивалось (35% против 19%). Сформированные белковые гранулы в присутствии краудинг-агента *in vitro* наблюдались на LSM на просвет, а также по флуоресценции белка, связанного с Су3. Для полученных гранул также были проведены эксперименты по FRAP, при этом уравнение аппроксимации двумя экспонентами описывало зависимость $I(t)$ с R^2 , близким к единице.

Полученные результаты частично подтверждают гипотезу о том, что динамика СГ при удалении АТФ снижается, о чем свидетельствует уменьшение процента быстрой мобильной фракции F_1 . Данные результаты, однако, еще требуют уточнения, поскольку времена восстановления в эксперименте с удалением АТФ уменьшаются, что не согласуется с опубликованными ранее результатами [5]. Различия в результатах, однако, может быть связано с разными выборами уравнений, аппроксимирующих $I(t)$. Была отработана методика формирования гранул *in vitro*, и проведенные эксперименты по FRAP показывают, что гранулы *in vitro* обладают схожими параметрами динамики СГ. В дальнейшем планируется уточнение экспериментов для исследования динамики СГ в клетках, планируется приме-

нить метод Fluorescence Lifetime Imaging Microscopy (FLIM) [9]. Для исследования гранул *in vitro* планируется применить метод DLS [10], а также планируется изучение образования гранул при добавлении других краудинг-агентов (PEG, Dextran) и при разных pH.

Литература

1. Nover L., Scharf K.D., Neumann D. Cytoplasmic heat shock granules are formed from precursor particles and are associated with a specific set of mRNAs // *Mol Cell Biol.* 1989. V. 9(3). P. 1298.
2. Buchan J.R., Parker R. Eukaryotic Stress Granules: The Ins and Outs of Translation // *Molecular Cell.* 2009. V. 36(6). P. 932.
3. Patel A. [et al.]. A liquid-to-solid phase transition of the ALS protein FUS accelerated by disease mutation // *Cell.* 2015. V. 162(5). P. 1066.
4. Alberti S., Anthony A.H. Are aberrant phase transitions a driver of cellular aging? // *BioEssays.* 2016. V. 38(10). P. 959.
5. Jain S. [et al.]. ATPase-modulated stress granules contain a diverse proteome and substructure // *Cell.* 2016. V. 164(3). P. 487.
6. Yang P. [et al.]. G3BP1 Is a Tunable Switch that Triggers Phase Separation to Assemble Stress Granules // *Cell.* 2020. V. 181(2). P. 325.
7. Taylor N.O. [et al.]. Quantifying Dynamics in Phase-Separated Condensates Using Fluorescence Recovery after Photobleaching // *Biophysical Journal.* 2019. V. 117(7). P. 1285.
8. McEwen E. [et al.]. Heme-regulated Inhibitor Kinase-mediated Phosphorylation of Eukaryotic Translation Initiation Factor 2 Inhibits Translation, Induces Stress Granule Formation, and Mediates Survival upon Arsenite Exposure // *The Journal of Biological Chemistry.* 2005. V. 280(17). P. 16925.
9. Pliss A. [et al.]. Cycles of protein condensation and discharge in nuclear organelles studied by fluorescence lifetime imaging // *Nature communications.* 2019. V. 10(1). P. 1.
10. Stetefeld J., McKenna S.A., Patel T.R. Dynamic light scattering: a practical guide and applications in biomedical sciences // *Biophys Rev.* 2016. V. 8. P. 409.

УДК 577.352.45

Задание ориентации белков при направленной экспрессии во внутренней мембране митохондрий

*С.М. Бухалович¹, А.Д. Власова¹, Д.Ф. Багаева¹, С.М. Долотова¹,
Н.С. Ильинский¹, А.И. Куклин^{1,2}, В.И. Горделий^{1,2,3}*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединенный институт ядерных исследований

³Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes – Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives – CNRS

Оптогенетика сегодня имеет ряд оригинальных направлений. Одно из таких направлений сосредоточено на узкоспециализированном влиянии на определённые органеллы. Применяя адресную доставку белков (в том числе родопсинов) в органеллы, можно локализовать оптогенетические эффекты. С помощью светочувствительных ионных каналов и помп, а также других ферментов можно изменять в одном выбранном компартменте различные параметры (например, pH и концентрацию различных ионов), осуществлять фотоактивацию ферментов и других молекул. В совокупности с хорошим временным и пространственным разрешением освещения данный подход в итоге предоставляет большое количество вариантов влияния на клетки и ткани. Отдельный вопрос составляет ориентация родопсинов в мембране целевого компартмента. В литературе были представлены данные об изменении ориентации канального родопсина на плазматической мембране клеток человека за счёт добавления дополнительной трансмембранной спирали на N-конец исследуемого белка [1].

В данной работе был применён аналогичный подход при конструировании сигнальных последовательностей для доставки родопсинов в определённой ориентации во внутреннюю мембрану митохондрий (ИММ). Также показано, что при использовании сигнальной последовательности на основе Mitofilin достигается ориентация, при которой C-конец родопсина ориентирован в матрикс митохондрий [2].

В настоящее время известно несколько сигнальных последовательностей и конструкций, содержащих их для адресной доставки различных типов белков в конкретные митохондриальные компартменты. В данной работе сигнальные последовательности [3–4], были модифицированы добавлением

трансмембранных спиралей на их С-конец. С данными модификациями сигнальных последовательностей были экспрессированы родопсины с флуоресцентными метками. Было показано, что в зависимости от выбранной модификации сигнальной последовательности (количества спиралей после сигнала) и от химерно сшитого с ней эффекторного белка достигается разная ориентация в ИММ. Ориентация белков в мембране определялась с помощью тушения флуоресценции меток при последовательной пермеабиллизации мембран митохондрий [5]. Описанный подход является более гибким в сравнении с тем, в котором используют нативные сигнальные последовательности. Он позволит расширить возможности оптогенетики митохондрий.

Работа выполнена при поддержке РФФ, грант № 21-64-00018.

Литература

1. *Brown J. et al.* Expanding the optogenetics toolkit by topological inversion of rhodopsins // *Cell*. 2018. Т. 175. № 4. С. 1131–1140. e11.
2. *Kim M. et al.* Optical Control of CD8+ T Cell Metabolism and Effector Functions // *Frontiers in immunology*. 2021. V. 12. P. 2039.4.
3. *Tkatch T. et al.* Optogenetic control of mitochondrial metabolism and Ca²⁺ signaling by mitochondria-targeted opsins // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2017. V. 114. № 26. P. E5167–E5176.
4. *Ernst P. et al.* Precisely control mitochondria with light to manipulate cell fate decision // *Biophysical journal*. 2019. V. 117. № 4. P. 631–645.
5. *Lee H., Kim H.* Membrane topology of transmembrane proteins: determinants and experimental tools // *Biochemical and biophysical research communications*. 2014. V. 453. № 2. P. 268–276.

УДК 535.346.1

Навигация в интраоперационном поле методом спектроскопии диффузного отражения: исследование на оптических фантомах

П.С. Церегородцева¹, К.Е. Буянкин^{1,2}, Б.П. Якимов^{1,2}, Г.С. Будылин^{2,3}, Е.А. Шишин^{1,2}

¹ Физический факультет Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова

² Медицинский научно-образовательный центр МГУ им. М.В. Ломоносова

³ Институт спектроскопии РАН

В последнее время активно развиваются оптические спектральные методы обнаружения опухолей различных тканей. Главное преимущество таких методов заключается в молекулярной селективности и возможности их применения непосредственно в ходе операции [1–3]. В представленной работе рассмотрена задача обнаружения края опухоли с помощью одноволоконной реализации метода спектроскопии диффузного отражения (Diffuse Reflectance Spectroscopy, DRS) с использованием оптических фантомов с однородным и неоднородным распределением хромофоров, которые имитируют оптические свойства здоровых и патологических тканей мочевого пузыря.

В работе исследованы три общих вопроса: зависимость наблюдаемых спектров от геометрии наблюдения, вопрос о зависимости резкости границы от высоты расположения волокна над тканью и зависимость вида спектров для неоднородных по глубине структур.

Первым было проведено исследование зависимости формы спектров диффузного отражения оптических фантомов с равномерным распределением хромофоров от угла и расстояния до их поверхности для однородных фантомов биоткани. В результате было получено, что форма спектров не зависит от расстояния до волокна. Также при изменении угла между волокном и нормалью к поверхности фантома спектры имеют небольшой разброс, который примерно в 3 раза меньше разницы спектров фантомов здоровой и опухолевой тканей.

Для оценки резкости границы был приготовлен неоднородный фантом, а затем с помощью линейного транслятора произведено сканирование его оптических свойств для различной высоты расположения волокна. В результате измерений было получено, что границы области, имитирующей опухоль, размываются тем больше, чем больше расстояние между оптоволоконном и фантомом, при этом высота сканирования до 10 мм позволяет определять границу опухоли с точностью до 2 мм.

Третьей задачей представленной работы стало исследование изменения сигнала DRS в случае неоднородно распределенных по глубине хромофоров. Для ее решения мы подготовили двуслойный оптический фантом с изменяющейся толщиной слоев. Срез фантома вдоль направления изменения

толщины представлен на рис. 1а. Для оценки формы спектров фантома рассчитывалась величина $\Delta OD = OD(550\text{нм}) - OD(650\text{нм})$, где

$$OD = -\ln R \quad (1)$$

$$R = \frac{I - I_{\text{темн}}}{I_{\text{реф}} - I_{\text{темн}}} \quad (2)$$

где R – показатель отражения, $I_{\text{темн}}$ – интенсивность фонового сигнала, $I_{\text{реф}}$ – интенсивность отраженного сигнала от референсного образца и I – интенсивность отраженного сигнала от исследуемого образца. Чтобы сопоставить ΔOD с истинной глубиной неоднородности, фантом был позже разрезан по линиям сканирования, были сделаны изображения и измерена глубина неоднородности (расстояние до поверхности измерения). Было получено, что при сканировании области, соответствующей наибольшему изменению толщины фантома, ΔOD линейно увеличивается с уменьшением толщины неоднородности. Также было показано, что минимальная обнаружимая данным методом толщина неоднородности может быть оценена как $\sim 0,2$ мм.

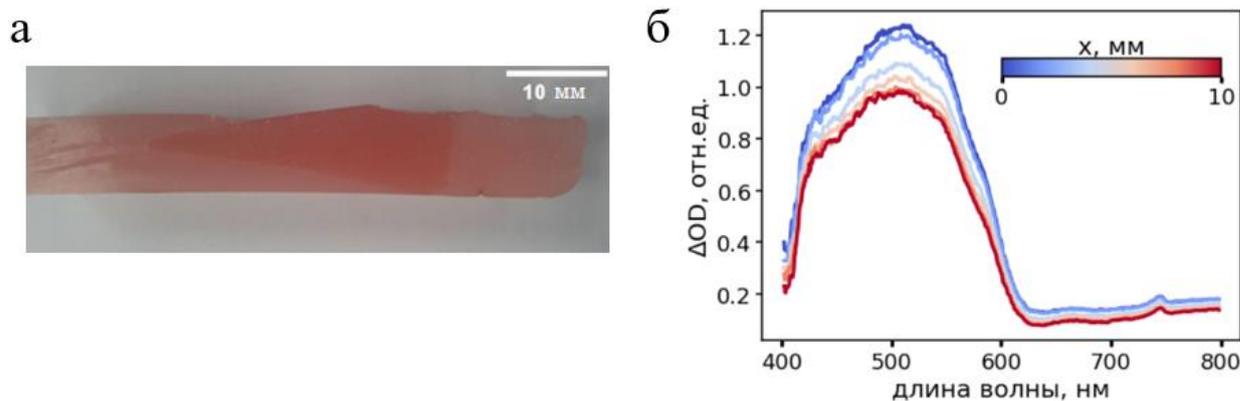


Рис. 1. (а) Срез двуслойного оптического фантома вдоль направления изменения толщины слоев, (б) зависимость формы спектров оптической плотности фантомов от положения детектирующего волокна

На основе проведенного исследования будут выработаны рекомендации для проведения диагностики тканей мочевого пузыря и обнаружения границы опухоли в ходе планируемых экспериментов *in vivo* в МНОЦ МГУ.

Литература

1. *Baltussen E.J.M. et al.* Diffuse reflectance spectroscopy as a tool for real-time tissue assessment during colorectal cancer surgery // *Journal of biomedical optics*. 2017. Т. 22. № 10. С. 106014.
2. *Amiri S.A. et al.* Intraoperative tumor margin assessment using diffuse reflectance spectroscopy: the effect of electrosurgery on tissue discrimination using ex vivo animal tissue models // *Biomedical Optics Express*. 2020. Т. 11. № 5. С. 2402–2415.
3. *Santos I.P. et al.* Raman spectroscopy for cancer detection and cancer surgery guidance: translation to the clinics // *Analyst*. 2017. Т. 142. № 17. С. 3025–3047.

Диффузный имиджинг с использованием пространственно-структурированного света для навигации в интраоперационном поле

К.Е. Буянкин^{1,2}, П.С. Церегородцева¹, Б.П. Якимов^{1,2}, Г.С. Будылин^{2,3}, Е.А. Шишин^{1,2}

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

² Медицинский научно-образовательный центр МГУ им. М.В. Ломоносова

³ Институт спектроскопии РАН

Диффузная спектроскопия и имиджинг все активнее используются в хирургической навигации для определения границ опухолей, в том числе при проведении малоинвазивных эндоскопических операций внутренних органов. Среди методов визуализации, имиджинг с использованием пространственно-структурированного света (англ. Spatial frequency domain imaging, SFDI) в последние годы привлекает всё большее внимание благодаря способности полностью количественно определять концентрации различных хромофоров в тканях и возможности определять их глубинное распределение [1].

Метод SFDI представляет собой модификацию мультиспектрального имиджинга, в котором на исследуемую область ткани проецируется световое поле с пространственно-модулированной (обычно синусоидально) интенсивностью. Используя калибровку относительно образца с известными оптическими свойствами и получая сигнал на нескольких пространственных частотах, можно составить карту коэффициентов рассеяния и поглощения исследуемого объекта, из чего можно получить информацию об абсолютной концентрации различных хромофоров. Более того, вариация пространственной частоты позволяет контролировать глубину измерения, предоставляя информацию из разных слоев ткани [2].

В этой работе на примере оптического фантома с гетерогенным распределением хромофоров, имитирующих оптические свойства нормальных и патологических тканей мочевого пузыря была оценена точность определения границ опухоли с помощью метода SFDI. Также было показано, как отклик диффузного отражения, полученный на разных пространственных частотах, может быть использован не только для количественного отображения коэффициентов поглощения и рассеяния нормальных тканей и опухолеподобных неоднородностей, но и для оценки глубины локализации опухоли (рис. 1). Продемонстрированные результаты показывают перспективы дальнейшего развития метода SFDI в хирургической навигации.

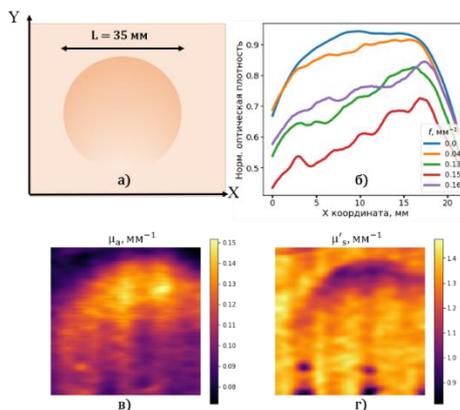


Рис. 1. Схема оптического фантома опухоли (а). На панели (б) показаны профили оптической плотности вдоль оси X, на которых наблюдается уменьшение видности опухолевой гетерогенности с увеличением пространственной частоты. Карты коэффициентов поглощения (в) и приведенного рассеяния (г)

Литература

1. Angelo J.P., van de Giessen M., Gioux S. Real-time endoscopic optical properties imaging // Biomed. Opt. Express 8, 5113–5126 (2017).
2. Cuccia D.J., Bevilacqua F.P., Durkin A.J., Ayers F.R., Tromberg B.J. Quantitation and mapping of tissue optical properties using modulated imaging // J. Biomed. Opt. 14(2) 024012 (1 March 2009).

Изучение процесса олигомеризации апоферритина методом негативного контрастирования

*В.В.Сударев¹, Ю.Л.Рижиков^{1,2}, А.В.Власов^{1,2}, А.А.Царенко¹,
А.В.Рогачев^{1,2}, В.И.Горделий^{1,3,4}, А.И.Куклин^{1,2}*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединенный институт ядерных исследований

³Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes – Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives – CNRS

⁴JuStruct: Jülich Center for Structural Biology, Forschungszentrum Jülich

Ферритин – один из основных железосодержащих белков в организме, осуществляющий внутриклеточный гомеостаз железа. Во внутренней полости белковой глобулы (называемой апоферритином) может содержаться до 4500 ионов этого микроэлемента в форме ферригидрита [1]. Ферритин в растворе может образовывать различные олигомеры (димеры, тримеры и т.д.). Процессы олигомеризации данного белка изучены слабо. Возможно, связывание частиц белка происходит посредством взаимодействия гидрофобных аминокислот в четырехфолдных каналах [2]. Также вероятен путь олигомеризации посредством контактов между двухфолдными каналами, который реализуется при кристаллизации [3].

В работе получены микрофотографии белкового раствора апоферритина методом негативного контрастирования. На полученных микрофотографиях идентифицированы изображения объектов, соответствующих различным олигомерным состояниям апоферритина, а именно мономеры, димеры, тримеры, а также более крупные белковые кластеры.

Для предполагаемых димеров апоферритина построена гистограмма распределения расстояний между центрами белков. Полученные данные позволяют выделить два класса белковых пар (димеров). Первый класс («истинные» димеры) составляют белки с расстояниями менее 13 нм (удвоенный радиус ферритина) между центрами. Димеры второго класса представляют собой пары близко расположенных друг к другу мономеров (расстояние между центрами около 14 нм) и составляют до трети всей димерной фракции. Предположительно их наличие обусловлено распадом олигомерного состояния в ходе высушивания образца. Аналогичный эффект наблюдается и для тримерной фракции.

Обнаружены тримеры белка, образованные благодаря различным механизмам олигомеризации. Выявлено несколько типов различных тримеров, например, с наибольшим углом 60°, 90°, 120° и 180° соответственно. Определено процентное соотношение различных олигомерных фракций в растворе белка. Около 50% исследуемых объектов составляют мономеры, около 40% – димеры (70% из них – «истинные» димеры), до 3% – каждая из тримерных фракций.

Таким образом, в ходе работы обнаружены тримеры, образованные различными механизмами олигомеризации. В частности, предполагается, что 60° и 120° соответствуют кристаллическим контактам, а 90° – гидрофобному взаимодействию четырехфолдных каналов. «Линейные» тримеры (с углом 180°) могут соответствовать обоим типам взаимодействий. Кроме того, обнаружен эффект распада белковых олигомеров при высушивании образца.

Литература

1. *Arosio P., Elia L., Poli M.* Ferritin, cellular iron storage and regulation // *IUBMB life*. 2017. Т. 69. № 6. С. 414–422.
2. *Yau S. T. et al.* Molecular mechanisms of microheterogeneity-induced defect formation in ferritin crystallization // *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*. 2001. Т. 43. № 4. С. 343–352.

Исследование влияния микроклиматических условий на рост белковых кристаллов in meso

*А.С. Казанцев¹, А.О. Бердникова¹, Р.О. Асташкин³,
Д. Братанов⁴, А.И. Куклин^{1,2}, В.И. Горделий^{1,3}*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединенный институт ядерных исследований

³Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS, F-38027 Grenoble, France

⁴Institute of Biological Information Processing, Forschungszentrum Jülich, 52428 Jülich, Germany

Мембранные белки являются целью воздействия большого количества лекарств. Получение структуры мембранных белков является одной из приоритетных задач современной структурной биологии. Основным способом получения структур высокого разрешения является кристаллизация мембранных белков в липидных мезофазах (in meso) [1–3] с дальнейшим получением структуры с помощью дифракции рентгеновских лучей на образовавшихся кристаллах.

Для улучшения качества кристаллизации необходимо изучать формирование и поведение кристаллизационного матрикса, т.е. липидных мезофаз в различных условиях.

С использованием метода малоуглового рентгеновского рассеяния были произведены измерения образцов, состоящих из белка бактериородопсина, солюбилизованном в бетаоктилглюкозиде, моноолеина, различных пресипитантов (NaAc, AmSO₄, Mes) в различных динамических микроклиматических условиях (относительная влажность >90%, температура 20–22 °С). Кроме того, сами плашки, на которых помещались капли описанной выше смеси, были двух типов: «сэндвич» из двойных СОС-плёнок с буфером между ними, покрытые с краёв вакуумной смазкой, и одинарные СОС-плёнки.

Были вычислены типы и параметры решёток липидных мезофаз [4–5]. Определена динамика высыхания липидных мезофаз.

С учётом точности эксперимента, систематических статистически значимых изменений параметров решётки не обнаружено ни в двойных, ни в одиночных СОС-плёнках. На временном промежутке в 1 неделю в части образцов обнаружены фазовые переходы из La в Pn3m фазу. Наличие высыхания может быть связано с изменением параметров решётки липидных мезофаз. С учётом точности высыхания обнаружено не было, т.к. не обнаружено изменений параметров решётки.

При дальнейшей разработке темы данной работы необходимо будет повысить статистическую значимость результатов путём проведения большего количества экспериментов с более чётким контролем микроклимата.

Литература

1. Garavito R.M., Rosenbusch J.P. Three-dimensional crystals of an integral membrane protein: an initial x-ray analysis // *J. Cell Biol.* 1980. V. 86, № 1. P. 327–329.
2. Michel H., Oesterhelt D. Three-dimensional crystals of membrane proteins: bacteriorhodopsin // *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 1980. V. 77, № 3. P. 1283–1285.
3. Landau E.M., Rosenbusch J.P. Lipidic cubic phases: a novel concept for the crystallization of membrane proteins // *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 1996. V. 93, № 25. P. 14532–14535.
4. Anderson D., Gruner S.M., Leibler S. Geometrical aspects of the frustration in the cubic phases of lyotropic liquid crystals // *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 1988. V. 85, № August. P. 5364–5368.
5. Cherezov V. The Cherezov Lab – LCP Resources: Useful Equations [Electronic resource]. URL: http://cherezov.usc.edu/lcp_equations.htm (accessed: 17.10.2021).

Экспрессия, очистка и кристаллизация фрагмента бактериальной гистидин-киназы, содержащего сенсорный, ТМ и НАМР домены

О.Ю. Семенов¹, И.М. Гончаров¹, В.В. Назаренко¹, А.А. Ремеева¹, И.Ю. Гуцин¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Двухкомпонентные системы играют важную роль в жизни бактерий, служа для адаптации к постоянно изменяющимся условиям окружающей среды. Наиболее распространенной первой компонентой этих систем являются сенсорные гистидин-киназы [1]. При этом знание атомарной структуры является важным элементом в определении механизма передачи ими сигнала. На данный момент определены структуры некоторых сенсорных доменов, но структуры сенсорного домена вместе с трансмембранной частью определены только для комплекса сенсорного родопсина с его трансдьюсером [2] и гистидин-киназы NarQ [3].

Ранее в нашей лаборатории был закристаллизован фрагмент бактериальной сенсорной гистидин киназы NarQ, содержащий сенсорный, ТМ и НАМР домены, и была решена его структура [3]. Целью данной работы является получение кристаллов фрагмента, включающего сенсорный, ТМ и НАМР домены гистидин-киназы Cagg_2625 из бактерии *Chloroflexus aggregans*.

Была получена конструкция, кодирующая вышеописанный фрагмент, был произведен белковый препарат высокой степени чистоты, при кристаллизации получены белковые кристаллы. В данный момент идет оптимизация условий кристаллизации для получения кристаллов более высокого качества, пригодных для сбора дифракционных данных и расшифровки структуры.

Литература

1. *Krell T. e [et al.]*. Bacterial Sensor Kinases: Diversity in the Recognition of Environmental Signals // Annual Review of Microbiology. 2010. V. 64, N 1, P. 539–559.
2. *Gordeliv V. I. [et al.]*. Molecular basis of transmembrane signalling by sensory rhodopsin II–transducer complex // Nature. 2002. V. 419, N 6906, P. 484–487.
3. *Gushchin I. [et al.]*. Mechanism of transmembrane signaling by sensor histidine kinases // Science. 2017. V. 356, N 6342, P. eaah6345.

Молекулярные основы спектральной настройки флавин-связывающих флуоресцентных белков со смещением в синий и красный цвета

**В.В. Назаренко¹, А.А. Ремеева¹, А. Богородский¹,
К. Ковалев^{1,2}, В. Борщевский^{1,3,4}, И.Ю. Гуцин¹**

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²European Molecular Biology Laboratory

³IBI-7: Structural Biochemistry, Forschungszentrum Jülich GmbH

⁴JuStruct: Jülich Center for Structural Biology, Forschungszentrum Jülich

Флавин-связывающие флуоресцентные белки (FbFP), созданные на основе про- и эукариотических фоторецепторов света, кислорода, напряжения (LOV), являются многообещающими флуоресцентными репортерными белками. Их небольшой размер (около 10 кДа для мономерных FbFP), а также независимая от кислорода флуоресценция делают их идеальными репортерами для мониторинга транспорта и анаэробных биологических процессов [1]. Они также используются в биосенсорах молекулярного кислорода [2] или pH [3] в качестве донорного домена для резонансной передачи энергии Фёрстера (FRET). Белки из семейства зеленых флуоресцентных белков (GFP) очень популярны для аналогичных применений в науках о жизни, но имеют явные недостатки из-за их большего размера и потребности в молекулярном кислороде для созревания хромофоров, что часто приводит к неудаче при использовании в анаэробных условиях [1].

Приложения, такие как получение многоцветных изображений, разработка FRET-биосенсоров на основе FbFP, многоцветная корреляционная световая электронная микроскопия и оптогенетика на основе LOV, требуют разработки спектрально смещенных FbFP. Поглощение и флуоресценция FbFP

определяется свойствами нековалентно связанных флавинов, на оптические свойства которых, как предполагалось, не могут влиять мутации полипептидной цепи. Тем не менее ранее были найдены варианты с одиночной Q489K [4] и двойной мутацией V392T-Q489K [5] для белка iLOV, которые имели сдвиг пика флуоресценции в синюю и красную область, соответственно. Чтобы проверить универсальность этих мутаций для семейства LOV, мы ввели соответствующие мутации Q148K и Q148K-I52T в недавно разработанный нами термостабильный белок CagFbFP из термофильной фототрофной бактерии *Chloroflexus aggregans* [6]. Новые варианты FbFP демонстрируют аналогичные, но значительно отличающиеся спектры (смещение максимума флуоресценции ≈ 6 нм в синюю и ≈ 7 нм в красную область, соответственно) и время жизни флуоресценции, что может быть применено во флуоресцентной микроскопии для разделения двух FbFP по разнице в спектре или времени жизни. Мы продемонстрировали пригодность новых мутантов FbFP для этой цели, трансформировав клетки *E. coli* плазмидами, несущими гены CagFbFP – Q148K (вариант со смещением в синий цвет) и CagFbFP – I52T – Q148K (вариант со смещением в красный цвет). Было показано, что идентифицированные мутанты позволяют проводить двухцветную микроскопию с одной длиной волны возбуждения и наблюдением в одном спектральном диапазоне (рис. 1) [5]. Хотя варианты с синим и красным смещением спектрально не сильно различаются, дифференцирование двух белков возможно в сочетании с современными флуоресцентными методами, такими как спектральное разделение (коммерчески доступный метод с использованием высококачественных конфокальных флуоресцентных микроскопов).

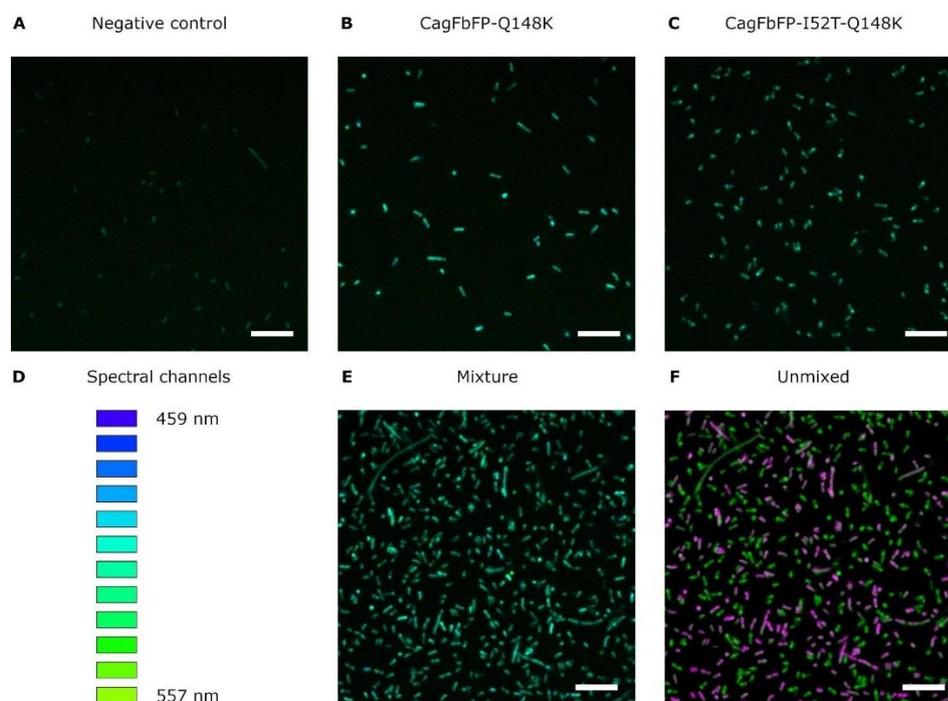


Рис. 1. Визуализация клеток *E. coli*, трансформированных различными вариантами FbFP. Показано комбинированное представление интенсивности флуоресценции и спектра флуоресценции излучения в пикселях. А) Нетрансформированные клетки *E. coli*, используемые в качестве отрицательного контроля. Б) Клетки *E. coli*, экспрессирующие CagFbFP-Q148K. В) Клетки *E. coli*, экспрессирующие CagFbFP-I52T-Q148K. Д) Диаграмма, показывающая воспринимаемые цвета для различных каналов получения флуоресценции. Использовались двенадцать каналов от 459 до 557 нм с шагом 9 нм. Е) Смесь клеток *E. coli*, экспрессирующих CagFbFP-Q148K, и клеток *E. coli*, экспрессирующих CagFbFP-I52T-Q148K. Ф) То же, что и Е), обработано с использованием линейного разделения. Клетки, экспрессирующие CagFbFP-Q148K, выделены пурпурным цветом, а клетки, экспрессирующие CagFbFP-I52T-Q148K, выделены зеленым

Исследования проводились при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-34-70109).

Литература

1. Drepper T. [et al.]. Reporter proteins for in vivo fluorescence without oxygen // Nat. Biotechnol. 2007. V. 25. P. 443–445.
2. Potzkei J. [et al.]. Real-time determination of intracellular oxygen in bacteria using a genetically encoded FRET-based biosensor // BMC Biol. 2012. V. 10. P. 28.

3. *Rupprecht C. [et al.]*. A novel FbFP-based biosensor toolbox for sensitive in vivo determination of intracellular pH // *J. Biotechnol.* 2017. V. 258. P. 25–32.
4. *Davari M.D. [et al.]*. Photophysics of the LOV-based fluorescent protein variant iLOV-Q489K determined by simulation and experiment // *J. Phys. Chem. B.* 2016. V. 120. P. 3344–3352.
5. *Röllen K. [et al.]*. The molecular basis of spectral tuning in blue- and red-shifted flavin-binding fluorescent proteins // *J. Biol. Chem.* 2021. V. 296. P. 100662.
6. *Nazarenko V. [et al.]*. Thermostable flavin-based fluorescent protein from *Chloroflexus aggregans*: A framework for ultra-high resolution structural studies // *Photochem. Photobiol. Sci.* 2019. V. 18. P. 1793–1805.

УДК 577.151.32

Внутренне неупорядоченные участки в АТФ-синтазах

С.Д. Осипов¹, А.В. Власов¹, В.Н. Уверский^{1,2}, А.И. Куклин^{1,3}, В.И. Горделий^{1,4,5,6}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Department of Molecular Medicine and Byrd Alzheimer's Research Institute, Morsani College of Medicine, University of South Florida, Тампа, Флорида, США

³Объединённый Институт Ядерных Исследований

⁴JuStruct: Jülich Center for Structural Biology, Forschungszentrum Jülich, Юлих, Германия

⁵Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Гренобль, Франция

⁶Institute of Biological Information Processing (IBI-7: Structural Biochemistry), Юлих, Германия

АТФ-синтаза является ключевым биоэнергетическим комплексом в живых организмах. Она синтезирует аденозин трифосфат (АТФ), универсальный источник энергии для большинства биохимических реакций. АТФ-синтазы F-типа обнаружены в бактериях и эукариотах. Субъединичный состав и структурная организация АТФ-синтаз в разных видах организмов может существенно различаться.

Структурные исследования АТФ-синтазы играют важную роль для изучения механизмов ее работы. АТФ-синтаза – большой (~ 600 кДа) комплекс, имеющий мембранную часть, и поэтому ее кристаллизация для последующего исследования с помощью рентгеноструктурного анализа является трудной задачей. На сегодняшний день большинство структур АТФ-синтаз получают с помощью криоэлектронной микроскопии.

При проведении структурных исследований важно учитывать, что некоторые субъединицы могут включать в себя внутренне неупорядоченные области. Структура, полученная с помощью рентгеноструктурного анализа или криоэлектронной микроскопии, представляет из себя только одну из множества возможных конформаций, что может быть недостаточно для понимания работы всего комплекса в целом. Такие неупорядоченные участки могут играть большую роль в функционировании АТФ-синтазы [1].

Существуют алгоритмы, позволяющие предсказать неупорядоченность полипептидной цепи по ее аминокислотной последовательности. В работе использовались шесть из них: PONDR® VLXT [2], PONDR® VL3 [3], PONDR® VLS2 [4], PONDR® FIT [5], IUPred2 (Short), IUPred2 (Long) [6].

В ходе работы были проанализированы аминокислотные последовательности субъединиц АТФ-синтазы из различных организмов. Были найдены участки, предположительно являющиеся внутренне неупорядоченными. Проведено сравнение внутренне неупорядоченных участков в АТФ-синтазах, выделенных из различных организмов. Найденные отличия могут свидетельствовать о наличии разных механизмов регуляции активности ферментов в различных видах [1].

Литература

1. *Mendoza-Hoffmann F. [et al.]*. Control of rotation of the F1FO-ATP synthase nanomotor by an inhibitory α -helix from unfolded ϵ or intrinsically disordered ζ and IF1 proteins // *Journal of bioenergetics and biomembranes.* 2018. V. 50, N 5. С. 403–424.
2. *Romero, P. [et al.]*. Sequence complexity of disordered protein. *Proteins Struct. Funct. Bioinforma.* 42, 38–48 (2000).
3. *Peng K. [et al.]*. Length-dependent prediction of protein intrinsic disorder // *BMC bioinformatics.* 2006. V. 7, N 1. С. 1–17.
4. *Peng K. [et al.]*. Optimizing long intrinsic disorder predictors with protein evolutionary information // *Journal of bioinformatics and computational biology.* 2005. V. 3, N 01. С. 35–60.
5. *Xue B. [et al.]*. PONDR-FIT: a meta-predictor of intrinsically disordered amino acids // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Proteins and Proteomics.* 2010. V. 1804, N 4. С. 996–1010.
6. *Mészáros B. [et al.]*. IUPred2A: context-dependent prediction of protein disorder as a function of redox state and protein binding // *Nucleic acids research.* 2018. V. 46, N W1. С. W329–W337.

Моделирование методом броуновской динамики зависящих от температуры сборки и разборки тубулиновых микротрубочек

И.А. Ельцов^{1,2}, У.В. Ульянов², Д.С. Виноградов³, Н. Б. Гудимчук^{2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет

³Центр теоретических проблем физико-химической фармакологии РАН

Микротрубочки – это динамические тубулиновые полимеры, которые выполняют множество важнейших функций на протяжении всего жизненного цикла каждой эукариотической клетки. Микротрубочки проявляют замечательную способность удлиняться и укорачиваться на несколько микрометров при резких переключениях между фазами сборки и разборки. Этот процесс очень чувствителен к температуре: микротрубочки легко деполимеризуются при охлаждении ниже температуры около 20°C.

Влияние температуры на стабильность микротрубочек плохо изучено, но оно используется в клеточной биологии как способ быстрого определения стабильности микротрубочек путем охлаждения клеток. Недавно наша лаборатория разработала вычислительную модель, описывающую динамику микротрубочек, используя комбинированный подход броуновской динамики и Монте-Карло. Эта модель предоставила точные описания структур наконечников микротрубочек во время сборки и разборки, а также позволила по-новому взглянуть на механизмы создания толкающих и тянущих сил динамическими микротрубочками. Здесь мы расширяем модель, чтобы описать чувствительность сборки и разборки микротрубочек к температуре. Наш анализ дает оценки активационных барьеров связей тубулин-тубулин и проливает новый свет на старую проблему термостабильности цитоскелета тубулина.

Температура играет сложную роль в поведении молекул. Рассматривая общую задачу перехода частиц через энергетический барьер, можно учесть сложный вклад температуры в присоединение тубулина к концу микротрубочки. Тем самым моделируя всю микротрубочку, можно избежать прямого моделирования всех молекул тубулинов плавающих в растворе, а сконцентрироваться на взаимодействии тубулинов внутри микротрубочки, вызванном множеством потенциалов: латеральными, лонгитудальными связями, потенциалом изгиба. Такой метод позволяет неявно учитывать зависимость от температуры поведения молекул тубулина вне микротрубочки, помимо явного моделирования внутри. Также этот способ позволяет оценить величину энергетического барьера в лонгитудальной связи тубулинов, равную примерно 3,4 ккал/моль.

Литература

1. *Gudimchuk N.B. et al.* Mechanisms of microtubule dynamics and force generation examined with computational modeling and electron cryotomography. *Nat Commun* 11, 3765 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41467-020-17553-2>
2. *Fygenson D.K. et al.* Phase diagram of microtubules // *Physical review. E, Statistical physics, plasmas, fluids, and related interdisciplinary topics* 50 2 (1994): 1579–1588.

Секция квантовой теории информации

УДК 530.145

Решение уравнения Пуассона при помощи квантовых алгоритмов и тензорных сетей

А.А. Мельников^{1,2}, А.И. Пахомчик^{1,2}, М.Р. Перельштейн^{1,2,3}

¹Terra Quantum AG

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³QTF Centre of Excellence, Department of Applied Physics, Aalto University School of Science

Уравнения в частных производных встречаются при описании практически любой физической и биологической системы. Одним из ключевых таких уравнений является уравнение Пуассона. Уравнение Пуассона имеет широкое применение во многих областях, например в вычислительной гидродинамике [1] и электростатике [2]. Обычно для дискретизации этого уравнения используется метод конечных разностей [3] или спектральные методы, при этом получается система линейных уравнений, решение которой аппроксимирует решение изначального дифференциального уравнения. В рамках данной работы, нами была использована техника тензорных сетей [4] для решения системы, получающейся после дискретизации уравнения Пуассона.

Изначально тензорные сети были созданы для решения многочастичных задач. В настоящее время их используют во многих приложениях, таких как обработка изображений, решение дифференциальных уравнений, решение задач оптимизации и аппроксимации [8]. Основной особенностью алгоритмов на тензорных сетях является логарифмический скейлинг по размеру задачи, что делает их похожими на квантовые компьютеры. Более того, даже архитектура связности современных квантовых компьютеров очень похожа на связность тензорных сетей. Из-за чего возникает естественный вопрос сравнения этих подходов, что и является одной из целей данной работы.

Нами было рассмотрено одномерное уравнение Пуассона с нулевыми граничными условиями:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & L & 0 \\ -1 & 2 & & \\ & M & O & M \\ & 0 & L & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}; b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ M \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad -u'' = 1 \text{ в } \Omega = [0,1]; u(0) = u(1) = 0.$$

После дискретизации этого уравнения в равноудаленных точках интервала, получаем следующую линейную систему уравнений:

$$Ax = b,$$

где

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & L & 0 \\ -1 & 2 & & \\ & M & O & M \\ & 0 & L & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}; b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ M \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Размерность матрицы A равна n , где n – количество точек дискретизации. Интересно, что матрицу A можно представить в виде Matrix Product Operator [5] ранга 3, при этом такая структура занимает лишь $3^2 * 2 * \log(n)$ памяти, вместо n^2 . Кроме того, вектор b представляется в виде Matrix Product State ранга 1. Таким образом, можно воспользоваться алгоритмом Alternating Minimal Energy method [6] по решению системы, представленной в виде тензорной сети. При этом, мы будем иметь лишь полилогарифмический скейлинг по количеству точек дискретизации.

Для оценки эффективности данного подхода, мы сравнили его с классическими и квантовыми алгоритмами решения систем.

Из классических методов нами был выбран наиболее часто-используемый для симметричных матриц метод сопряженных градиентов, который имеет скейлинг $O(n\sqrt{\kappa})$, где κ – число обусловленности матрицы A , и в нашем случае $\kappa \approx n^2$. Таким образом, данный алгоритмы обладают полиномиальной сложностью.

Из квантовых алгоритмов был выбран наиболее общий и продвинутый, на наш взгляд, алгоритм Чайлдса [7] по решению систем. Для оценки времени работы этого алгоритм нами были реализованы соответствующие квантовые схемы, и было подсчитано общее число гейтов в цепи. Далее, зная длительность каждого гейта, было подсчитано общее время работы алгоритма на квантовом компьютере для каждого из размеров матрицы. Оказалось, что количество гейтов в цепи масштабируется экспоненциально по числу кубитов. Мы предполагаем, что это связано с наличием большого числа «сложных» гейтов, таких как много-кубитные вентили Тоффоли, которые нужно раскладывать по элементарным гейтам. Стоит подчеркнуть, что анализ был выполнен для идеального квантового компьютера, то есть когда каждый кубит связан с каждым, нет декогеренции, и за одно измерение можно получить весь вектор состояния.

Результаты сравнения представлены на рис. 1.

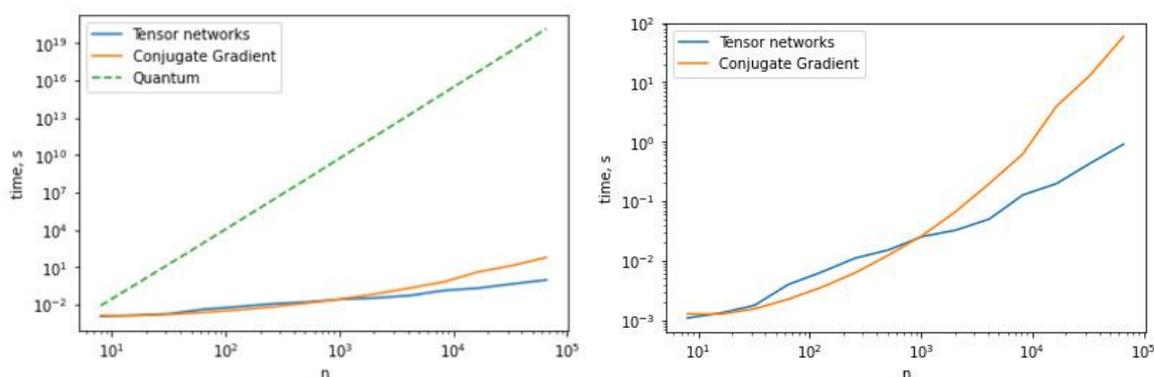


Рис. 1. Зависимость времени решения системы линейных уравнений с фиксированной ошибкой (10^{-6}) от ее размера для каждого из алгоритмов

На графиках видно, что при большом количестве точек дискретизации алгоритм на тензорных сетях является самым быстрым, при этом он экспоненциально превосходит другие два. Анализируя зависимость времени работы квантового алгоритма от размера задачи, можно заключить, что требуются его сильные улучшения, чтобы он мог конкурировать с классическими подходами.

Стоит подчеркнуть, что тензорные сети также можно применить и к другим дифференциальным уравнениям, таким как уравнение Больцмана, Фоккера–Планка, к уравнению Пуассона в общем виде, а также к уравнению Навье–Стокса. Анализ этих уравнений является предметом следующих работ.

Литература

1. *Batchelor G.K.* An introduction to fluid dynamics. Cambridge University Press, 2000.
2. *Griffiths D.J.* Introduction to electrodynamics // Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 1999.
3. *Forsythe G.E., Wasow W.R., Nachbar W.* Finite difference methods for partial differential equations // Phys. Today, 1961.
4. *Oseledets I.* Tensor-train decomposition // Scientific Computing, 2011.
5. *Kazeev V., Khoromskij B.* Low-rank explicit qtt representation of the Laplace operator and its inverse // SIAM, 2012.
6. *Dolgov S., Savostyanov D.* Alternating minimal energy methods for linear systems in higher dimensions // SIAM, 2014.
7. *Childs A.M., Kothari R., Somma, R.D.* Quantum Algorithm for Systems of Linear Equations with Exponentially Improved Dependence on Precision // SIAM, 2017.
8. *Zamarashkin N.L., Oseledets I.V., Tyrtysnikov E.E.* New Applications of Matrix Methods // Comput. Math. and Math. Phys. 61, 669–673 (2021).

Измерения наблюдаемых в многочастичной системе

Л.А. Маркович^{1,2,3}

¹Институт проблем управления им. Трапезникова РАН

²Институт проблем передачи информации им. Харкевича РАН

³Российский квантовый центр, Сколково

Проблема нахождения математического ожидания оператора, соответствующего наблюдаемой в системе, имеет первостепенное значение во многих областях современной науки. Например, во многих задачах физики конденсированного состояния, материаловедении, квантовой химии и комбинаторной оптимизации необходимо найти спектральные свойства, энергию основного состояния или наименьшее собственное значение гамильтониана. Прямая оценка среднего значения наблюдаемой O (гамильтониана H) для входного состояния $|\Psi\rangle$, разложенной на взвешенную сумму

$$O = \sum_{j=1}^N a_j P_j \quad (1)$$

строк Паули, непроста, а для больших систем практически невозможна. Чтобы получить оценку $\langle \Psi | O | \Psi \rangle$, состояние $|\Psi\rangle$ готовится много раз, и каждая строка Паули измеряется отдельно для получения оценок $\langle \Psi | P | \Psi \rangle$ [1, 2]. Очевидно, что для такой оценки подготовка $|\Psi\rangle$ и измерения каждого кубита повторяются многократно и должны выполняться эффективно.

В данной работе мы предлагаем альтернативный текущему методу подход, где вместо индивидуального измерения каждой строки Паули с дальнейшим классическим суммированием всех значений, мы предлагаем использовать квантовую природу системы и просуммировать все строки Паули связно. Используя метод фазового отката (phase kickback (англ.)) при квантовой оценке фазы (Quantum phase estimation (англ.)) [3, 4], каждая строка Паули кодируется в фазе и записывается во вспомогательный кубит таким образом, что сумма всех строк Паули кодируется в одной фазе как сумма нелинейных функций:

$$\phi_N = 2 \sum_{j=1}^N \arccos(a_j \sqrt{\varepsilon} \langle P_j \rangle). \quad (2)$$

где $\varepsilon \in [0,1]$ – свободный параметр, введенный для возможности проведения разложения Тейлора. Мы опускаем члены высшего порядка в разложении, чтобы упростить извлечение математического ожидания из арккосинуса. Однако, чтобы убрать ошибку, возникающую из-за пренебрежения членами высшего порядка, мы предлагаем метод ее исправления с помощью ограниченного числа квантовых измерений.

Наша схема состоит из двух частей: целевая квантовая система из кубитов с коротки когерентным временем и измерительное устройство со вспомогательным кубитом памяти, имеющим длительное когерентное время, достаточное для кодирования каждой строки Паули и выполнения оценки фазы. В результате наш подход обещает выигрыш $N^{2/3}$ по сравнению с классическим методом.

Литература

1. Peruzzo, A., McClean, J., Shadbolt, P., Yung, M.-H., Zhou, X.-Q., Love, P. J., Aspuru-Guzik, A., O'Brien, J.L., A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor // Nature Communications, 2014, V. 5.
2. McClean, J.R., Babbush, R., Love, P. J., Aspuru-Guzik, A., Exploiting locality in quantum computation for quantum chemistry // The Journal of Physical Chemistry Letters, 2014, V. 5, 24, P. 4368–4380.
3. Kitaev, A.Y., Quantum measurements and the abelian stabilizer problem // Conference, 1995, V. 1, P. 120–127.
4. Kimmel, S., Hao Low, G., Yoder, T.J., Robust calibration of a universal single-qubit gate set via robust phase estimation // Phys. Rev. A, 2015, V. 92, P. 062315.

Вынужденные колебания в открытой динамике квантового гармонического осциллятора

А.А. Терманова¹, С.Н. Филиппов^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

³Физико-технологический институт им. К.А. Валиева РАН

Эволюция системы при одновременном воздействии квантового управления и квантового шума – актуальная задача исследования, решение которой позволит усовершенствовать существующие способы управления квантовой динамикой и минимизировать негативные эффекты декогеренции. В работе исследована динамика квантового гармонического осциллятора, взаимодействующего с окружением и находящегося под действием внешней вынуждающей силы, зависящей от времени, вне адиабатического приближения [1]. Полный гамильтониан примет вид

$$H = p^2 / (2m) + m\omega^2 x^2 / 2 - f(t)x + \sum_k \omega_k (a_k^\dagger a_k + 1/2) + ix \sum_k g_k (a_k - a_k^\dagger)$$

в случае линейной связи между осциллятором с силой и резервуаром осцилляторов с омической спектральной плотностью $J(\omega) = 2m\pi^{-1}\Gamma\omega$. Динамику такого осциллятора можно найти и с помощью основного кинетического уравнения, однако оно, являясь приближением, не всегда может обеспечить достаточную точность. Вместо этого в микроскопической модели нами было получено точное уравнение динамики оператора координаты осциллятора $x(t)$ в представлении Гейзенберга:

$$\frac{d^2}{dt^2} x(t) + 2\Gamma \frac{d}{dt} x(t) + \omega^2 x(t) = \frac{1}{m} f(t) - i \sum_k \frac{g_k}{m} (a_k e^{-i\omega_k t} - a_k^\dagger e^{i\omega_k t}), \quad (1)$$

которое после усреднения по начальному состоянию, в предположении, что резервуар находился в тепловом равновесии, примет вид классического уравнения для осциллятора с силой. Путем решения

(1) была получена точная динамика операторов координаты и импульса ($\Delta = \sqrt{\omega^2 - \Gamma^2}$):

$$\begin{cases} x(t) = x e^{-\Gamma t} \left(\cos \Delta t + \Gamma \frac{\sin \Delta t}{\Delta} \right) + \frac{1}{m} p e^{-\Gamma t} \frac{\sin \Delta t}{\Delta} + \frac{1}{m} F_1(t) - i \sum_k \frac{g_k}{m} (\chi_k(t) a_k - \chi_k^*(t) a_k^\dagger), \\ p(t) = p e^{-\Gamma t} \left(\cos \Delta t - \Gamma \frac{\sin \Delta t}{\Delta} \right) - m\omega^2 x e^{-\Gamma t} \frac{\sin \Delta t}{\Delta} + F_2(t) - i \sum_k g_k (\xi_k(t) a_k - \xi_k^*(t) a_k^\dagger), \end{cases} \quad (2)$$

где функции $F_1(t) = \Delta^{-1} \int_0^t ds f(s) e^{-\Gamma(t-s)} \sin \Delta(t-s)$ и $F_2(t) = \dot{F}_1(t)$ определяются только внешней силой, а $\chi_k(t) = \left[e^{-i\omega_k t} - e^{-\Gamma t} \left(\cos \Delta t + \Delta^{-1} (\Gamma - i\omega_k) \sin \Delta t \right) \right] (\omega^2 - \omega_k^2 - 2i\Gamma\omega_k)^{-1}$ и $\xi_k(t) = \dot{\chi}_k(t)$ – частотами резервуара. После усреднения по начальному состоянию из (2) была найдена точная динамика первых моментов

$$\begin{cases} \langle x(t) \rangle = x_0 e^{-\Gamma t} \left(\cos \Delta t + \Gamma \frac{\sin \Delta t}{\Delta} \right) + \frac{1}{m} p_0 e^{-\Gamma t} \frac{\sin \Delta t}{\Delta} + \frac{1}{m} F_1(t), \\ \langle p(t) \rangle = p_0 e^{-\Gamma t} \left(\cos \Delta t - \Gamma \frac{\sin \Delta t}{\Delta} \right) - m\omega^2 x_0 e^{-\Gamma t} \frac{\sin \Delta t}{\Delta} + F_2(t). \end{cases} \quad (3)$$

Также из (2) получена динамика D_x, D_p и $C = \langle xp + px \rangle / 2 - \langle x \rangle \langle p \rangle$, которая не зависит от вынуждающей силы:

$$D_x(t) = D_x(0) e^{-2\Gamma t} \left(\cos \Delta t + \Gamma \Delta^{-1} \sin \Delta t \right)^2 + \frac{2}{m} C(0) e^{-2\Gamma t} \Delta^{-1} \sin \Delta t \left(\cos \Delta t + \Gamma \Delta^{-1} \sin \Delta t \right) + \frac{1}{m^2} D_p(0) e^{-2\Gamma t} \Delta^{-2} \sin^2 \Delta t + \frac{1}{m^2} \sum_k g_k^2 \coth \left[\frac{\omega_k}{2\Gamma} \right] |\chi_k(t)|^2 \quad (4)$$

$$D_p(t) = D_p(0) e^{-2\Gamma t} \left(\cos \Delta t - \Gamma \Delta^{-1} \sin \Delta t \right)^2 - 2m\omega^2 C(0) e^{-2\Gamma t} \Delta^{-1} \sin \Delta t \left(\cos \Delta t - \Gamma \Delta^{-1} \sin \Delta t \right) + m^2 \omega^4 D_x(0) e^{-2\Gamma t} \Delta^{-2} \sin^2 \Delta t + \sum_k g_k^2 \coth \left[\frac{\omega_k}{2\Gamma} \right] |\xi_k(t)|^2 \quad (5)$$

$$C(t) = -m\omega^2 D_x(0)e^{-2\Gamma t} \Delta^{-1} \sin \Delta t (\cos \Delta t + \Gamma \Delta^{-1} \sin \Delta t) + \frac{1}{m} D_p(0)e^{-2\Gamma t} \Delta^{-1} \sin \Delta t (\cos \Delta t - \Gamma \Delta^{-1} \sin \Delta t) + \\ + C(0)e^{-2\Gamma t} \left(\cos^2 \Delta t - \frac{\omega^2 + \Gamma^2}{\Delta^2} \sin^2 \Delta t \right) + \frac{1}{m} \sum_k g_k^2 \coth \left[\frac{\omega_k}{2T} \right] \operatorname{Re} \left[\chi_k(t) \xi_k^*(t) \right] \quad (6)$$

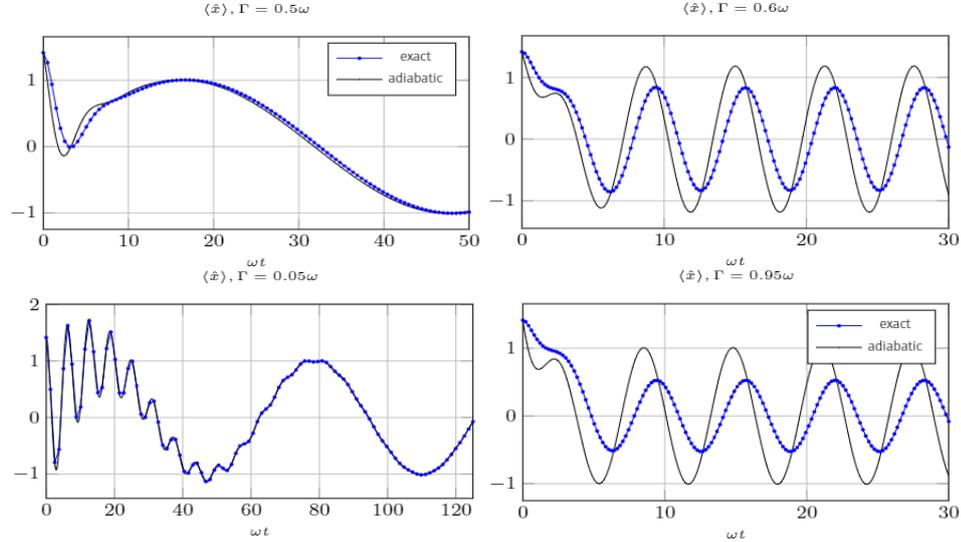


Рис. 1. Динамика дисперсий и ковариации операторов x и p осциллятора при $T = 0$ для двух различных значений скорости релаксации: $\Gamma = 0.05$ (верхний ряд) и $\Gamma = 0.5$ (нижний ряд). Сплошная линия соответствует результатам, полученным из точных уравнений Гейзенберга. Пунктирная линия отображает динамику, предсказанную основным кинетическим уравнением [2]. Параметры ω , $m = 1$. Начальное состояние когерентное

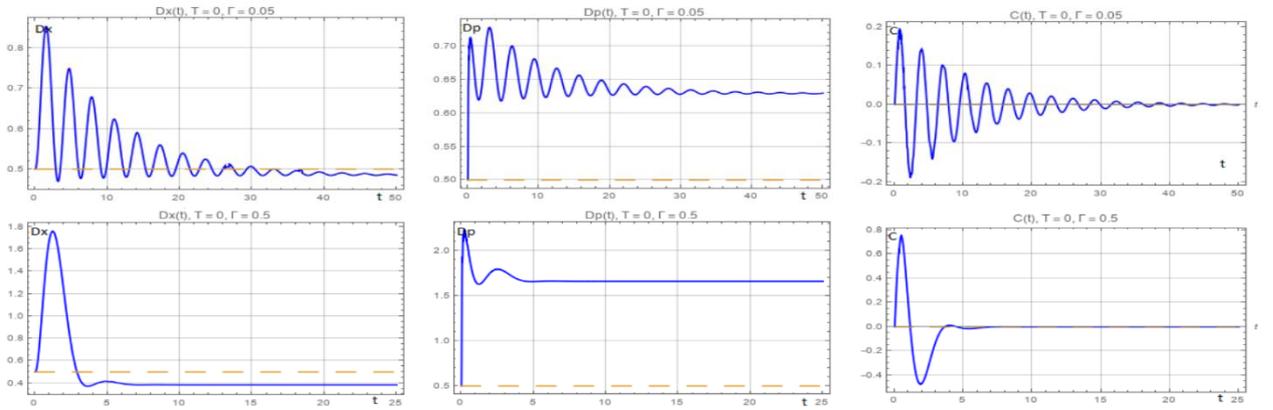


Рис. 2. Динамика дисперсий и ковариации операторов x и p осциллятора при $T = 0$ для двух различных значений скорости релаксации: $\Gamma = 0.05$ (верхний ряд) и $\Gamma = 0.5$ (нижний ряд). Сплошная линия соответствует результатам, полученным из точных уравнений Гейзенберга. Пунктирная линия отображает динамику, предсказанную основным кинетическим уравнением [2]. Параметры ω , $m = 1$. Начальное состояние когерентное

Из рис. 1 и 2 видно, что отличие результатов решения точных уравнений Гейзенберга и результатов, полученных из кинетического уравнения в адиабатическом приближении, возникает при быстром изменении вынуждающей силы (по сравнению с ω) и при наличии больших шумов. Значительное различие с предсказанной квантовым кинетическим уравнением возникает и у динамики вторых моментов, при чём чем больше скорость затухания Γ , тем больше дисперсии D_x и D_p в стационарном состоянии отличаются от предсказанных.

Полученные результаты открывают возможности для дальнейшего изучения динамики открытых квантовых систем при одновременном воздействии внешней силы и взаимодействии с окружающей средой, в частности, к когерентному управлению открытыми квантовыми системами, эффективно описываемыми квадратичными гамильтонианами.

Литература

1. Albash T. et al. Quantum adiabatic Markovian master equations // New Journal of Physics 14 12 (2012), P. 123016.
2. Breuer H.-P., Petruccione F. The theory of open quantum systems. 2002.

УДК 530.145

Нахождение минимальной длины тензора квантового процесса для восстановления немарковской динамики с повторяющейся эволюцией

Г.Н. Семин^{1,2}, С.Н. Филиппов^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

³Физико-технологический институт им. Валиева РАН

Квантовая немарковская динамика является наиболее общим видом процессов открытых квантовых систем. Ключевой особенностью таких процессов является наличие долгоживущих корреляций между квантовой системой и его окружением, из-за которых последующие состояния системы зависят от ее истории. Системы с немарковской динамикой в общем случае описываются уравнением Накажимы–Цванцига [1, 2], однако нахождение ядра памяти уравнения остается сложной вычислительной задачей. Тем не менее, немарковская динамика представляет особый интерес для задач квантового управления. Для решения таких задач управления квантовые немарковские процессы удобно представлять в виде «квантового гребня» («quantum comb») [3], в котором результирующее состояние квантовой системы зависит от его начального состояния и операций, проведенных над ней. Сам же процесс может быть представлен в виде некоторого тензора.

Рассмотрим открытую квантовую динамику, в которой начальные состояния квантовой системы S и окружения E фиксированы. Динамика определяется семейством унитарных операторов $U_{t_{i+1}:t_i}$, $i=0, L-1$, действующих на квантовую систему и его окружение на временных промежутках (t_i, t_{i+1}) . В моменты времени t_i над квантовой системой может быть совершены действия B_{t_i} , осуществляемые экспериментатором и являющиеся вполне положительными отображениями, сохраняющие след (СРТР). Экспериментатор может влиять на процесс только посредством выбора отображений B_{t_i} , поэтому конечное состояние системы будет зависеть от выбора этих отображений:

$$\rho_S^{(out)} = T(B_{t_0}, B_{t_1}, \dots, B_{t_N}), \quad (1)$$

где T – *тензор процесса*, описывающий заданную динамику открытой квантовой системы (рис. 1)

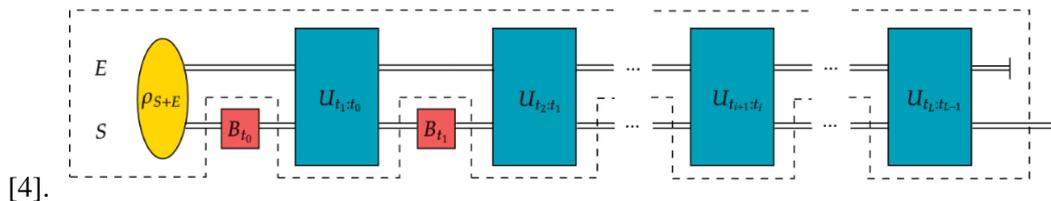


Рис. 1. Тензор процесса, выраженный в виде тензорной сети. Пунктирной линией выделен тензор процесса, который не может быть изменен экспериментатором. Начальное состояние составной системы $S + E$ выражено матрицей плотности ρ_{S+E} . Влияние на динамику осуществляется через подстановку СРТР отображений B_{t_i} в гнезда. Экспериментатор может считывать редуцированное состояние системы S на выходе

В данной работе исследуется особый вид открытых квантовых процессов с повторяющейся эволюцией между локальными отображениями, действующие на квантовую систему $U_{t_{i+1}:t_i} = U$, $i=0, L-1$. Ставится вопрос о нахождении тензор процесса минимальной длины L , достаточной для построения тензоров процесса с такой же промежуточной динамикой U и длиной $M > L$. В работе будет показано, что для двухуровневой квантовой системы с двухуровневым окружением и унитарной эволюцией

$$U = \exp\left(i \sum_{k=1}^3 a_k \sigma_k \otimes \sigma_k\right), \quad (2)$$

где $\sigma_k, k=1, 3$ – матрицы Паули, достаточно знать тензор процесса длиной $L=1$ в случае $a_1, a_2 \in \mathbb{R}, a_3=0$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 17-11-01388).

Литература

1. Zwanzig R. Ensemble Method in the Theory of Irreversibility // J. Chem. Phys., 1960, V. 33, P. 1338–1341.
2. Nakajima S. On Quantum Theory of Transport Phenomena: Steady Diffusion // Progress of Theoretical Physics, 1958, V. 20, P. 948–959.
3. Chiribella G., D'Ariano G.M., Perinotti P. Quantum Circuit Architecture // Phys. Rev. Lett., 2008, V. 101, P. 060401.
4. Pollock F.A., Rodríguez-Rosario C., Frauenheim T., Paternostro M., Modi K. Non-Markovian quantum processes: Complete framework and efficient characterization // Phys. Rev. A, V. 97, P. 012127.

УДК 530.145.1

Точная динамика моментов и корреляционных функций для фермионных уравнений ГКСЛ пуассоновского типа

Ю.А. Носаль^{1,2}, А.Е. Теретёнков²

¹Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

²Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

Основной результат данной работы состоит в обобщении результатов работы [1] на фермионный случай, а также в получении нового результата для многовременных упорядоченных корреляционных функций. Рассматривается необратимая квантовая динамика матрицы плотности в соответствии с уравнением Горини–Коссаковского–Сударшана–Линдблада (ГКСЛ) следующего вида:

$$\frac{d}{dt} \rho_t = L(\rho_t), \quad L(\rho) = \sum_{k=1}^K \lambda_k (U_k \rho U_k^\dagger - \rho), \quad \lambda_k > 0, \quad (1)$$

где $U_k = e^{-\frac{i}{2} c^\dagger H_k c}$ – унитарные операторы с генераторами, квадратичными по фермионным операторам рождения и уничтожения. Здесь $c = (c_1, \dots, c_n, c_1^\dagger, \dots, c_n^\dagger)^T$ – операторно-значный $2n$ -вектор операторов рождения-уничтожения, а H_k – $2n \times 2n$ матрицы, состоящие из комплексных чисел и удовлетворяющие условиям $H_k = -H_k^T = -\tilde{H}_k^0$, где операция $\tilde{\cdot}$ над произвольной $2n \times 2n$ матрицей A определяется как $\tilde{A} = EA^*E$, $A \in C^{2n \times 2n}$ (здесь * обозначено поэлементное комплексное произведение). Данные условия обеспечивают унитарность операторов U_k [2]. Члены, линейные по фермионным операторам рождения и уничтожения, не включаются в генераторы в силу правил суперотбора, требующих сохранения чётности фермионных матриц плотности [3].

В докладе будет представлена явная динамика моментов произвольного порядка, а также явные выражения для многовременных упорядоченных корреляционных функций. Основная идея, которая при этом будет использована, состоит в переходе к аналогу представления Гейзенберга для ГКСЛ-динамики, что возможно благодаря тому, что сопряжённый ГКСЛ-генератор может быть вычислен явно и имеет вид

$$L^* \left(\otimes_{m=1}^M c \right) = \sum_{k=1}^K \lambda_k \left(\otimes_{m=1}^M (U_k^\dagger c U_k) - \otimes_{m=1}^M c \right).$$

Унитарные преобразования операторов рождения-уничтожения могут быть посчитаны по формулам из [2]. После чего уравнения Гейзенберга могут быть усреднены по матрице плотности, что приводит к замкнутой динамике моментов одного порядка [4]. Совершая аналогичный переход к гейзенберговским эволюционным операторам в следующем выражении:

$$\langle c_{j_M}(t_M) \dots c_{j_1}(t_1) \rangle = \text{tr} \left(c_{j_M} e^{L(t_M - t_{M-1})} \dots c_{j_2} e^{L(t_2 - t_1)} c_{j_1} e^{L t_1} \rho_0 \right),$$

где $j_m = 1..2n$, для всех $m = 1..M$

можно получить динамику марковских многовременных упорядоченных корреляционных функций.

Таким образом, в работе были явно получены выражения для динамики моментов произвольного порядка матрицы плотности, удовлетворяющей уравнению (1), а также явный вид многовременных упорядоченных корреляционных функций.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 17-71-20154).

Литература

1. Teretenkov A.E. Dynamics of moments of arbitrary order for stochastic Poisson squeezing // arXiv:1909.10454 (2019)
2. Теретёнков А.Е. Динамика моментов для квадратичных ГКСЛ-генераторов // Матем. заметки, 106:1 (2019), 149–153.
3. Amosov G.G., Filippov S.N. Spectral properties of reduced fermionic density operators and parity superselection rule // Quantum Inf. Process., 16:1 (2017), 2–16.
4. Носаль Ю.А., Теретёнков А.Е. Точная динамика моментов и корреляционных функций для фермионных уравнений ГКСЛ пуассоновского типа // Матем. заметки, 108:6 (2020), 947–951 // Math. Notes, 108:6 (2020), 911–915.

УДК 517.958, 530.145

Метод GRAPE для открытых квантовых систем, находящихся под воздействием когерентного и некогерентного управлений

В.Н. Петруханов^{1,2}, А.Н. Печень^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

³Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Квантовое управление, то есть управление квантовыми системами, является важным инструментом для развития квантовых технологий [1]. В экспериментальных условиях управляемые системы часто не могут быть достаточно хорошо изолированы от влияния окружения, в связи с чем возникает необходимость рассматривать управление открытыми квантовыми системами. Кроме того, окружение может быть использовано как активный полезный ресурс для управления квантовыми системами, например, в рамках некогерентного управления [2, 3]. Управляемые системы, взаимодействующие с окружением, в марковской аппроксимации описываются уравнением Горини–Коссаковского–Сударшана–Линдблада (ГКСЛ) с гамильтонианом и диссипатором, зависящими от когерентного и некогерентного управлений. В рамках задач квантового управления возникает необходимость находить управление, максимизирующее некоторый функционал от траектории эволюции системы или ее конечного состояния, например, среднее значение наблюдаемой в заданный момент времени. Оптимальное управление может быть аналитически получено в редких случаях, чаще необходимо использовать численные методы [4–6], одним из которых является GRadiant Ascent Pulse Engineering (GRAPE).

До сих пор метод GRAPE использовался для замкнутых и открытых квантовых систем с когерентным управлением. В данной работе рассматривается обобщение метода GRAPE для открытых квантовых систем, находящихся под воздействием когерентного и некогерентного управлений [7]. Особенностью некогерентного управления является его неотрицательность в силу физического смысла, что накладывает некоторые трудности для оптимизации, которые в нашем подходе решены заменой переменных. Получено аналитическое выражение для градиента функционала типа Майера по управлению для общего случая N-уровневой квантовой системы. Подробно рассмотрена система, состоящая из одного кубита. В данном случае состояние системы можно визуально представить в шаре Блоха. Кроме того, в силу малой размерности системы возможно провести диагонализацию соответствующих 3x3 матричных экспонент, возникающих в формулах для эволюции системы и градиента целевого функционала.

Для этого были аналитически получены характеристические числа соответствующей матрицы правой части уравнения системы. Как отдельный результат было показано, что в случае постоянных управлений полуплоскость (u,n), где u – когерентное управление, n – некогерентное управление, разделяется на две области, отличающиеся динамикой системы, наподобие фазовой диаграммы. Кривая,

разделяющая данные области, в соответствующих координатах представляется плоской кубической кривой с возвратом. Работа алгоритма была продемонстрирована с помощью численного моделирования, разработана линейная по числу разбиений временного отрезка схема. В качестве оптимизируемого функционала был рассмотрен функционал, соответствующий задаче нахождения управления, переводящего систему из заданного начального состояния в заданное конечное целевое состояние. Результаты численного моделирования представлены в виде графиков.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Минобрнауки РФ (грант № 075-15-2020-788).

Литература

1. *Glaser S.J., Boscain U., Calarco T., Koch C.P., Köckenberger W., Kosloff R., Kuprov I., Luy B., Schirmer S., Schulte-Herbrüggen T., Sugny D., Wilhelm F.K.* Training Schrödinger's cat: quantum optimal control // *Eur. Phys. J. D.* 2015. V. 69. P. 279.
2. *Pechen A., Rabitz H.* Teaching the environment to control quantum systems // *Phys. Rev. A.* 2006. V. 73. P. 062102.
3. *Pechen A.N.* Engineering arbitrary pure and mixed quantum states // *Phys. Rev. A.* 2011. V. 84. P. 042106.
4. *Khaneja N., Reiss T., Kehlet C., Schulte-Herbrüggen T., Glaser S.J.* Optimal control of coupled spin dynamics: design of NMR pulse sequences by gradient ascent algorithms. *Journal of Magnetic Resonance.* 2005. V. 172, P. 296–305.
5. *De Fouquieres P., Schirmer S.G., Glaser S.J., Kuprov I.* Second order gradient ascent pulse engineering. *Journal of Magnetic Resonance.* 2011. V. 212. P. 412–417.
6. *Pechen A.N., Tannor D.J.* Quantum control landscape for a Lambda-atom in the vicinity of second-order traps, *Israel Journal of Chemistry.* 2012. V. 52, P. 467–472.
7. *Petruhanov V. N., Pechen A.N.* Gradient ascent pulse engineering for open quantum systems driven by coherent and incoherent controls (in preparation).

Секция космических исследований и современной астрофизики

УДК 533.9.01

Эффекты сжимаемости в волновых процессах во вращающейся астрофизической плазме в неупругом приближении

М.А. Федотова², А.С. Петросян^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский институт)

²Институт космических исследований РАН

В работе исследуются линейные магнитогидродинамические волны в устойчиво стратифицированном вращающемся слое сжимаемой плазмы в неупругом приближении. В данном приближении акустические волны отфильтрованы, а градиент плотности зависит как от градиента давления, так и от градиента температуры. Сила Кориолиса рассматривается в четырех различных приближениях: стандартной и нестандартной f -плоскостей, стандартной и нестандартной бета-плоскостей.

В работе найдены новые дисперсионные соотношения, описывающие волны в сжимаемых вращающихся течениях астрофизической плазмы. Эффекты сжимаемости в них представлены слагаемыми с частотой Брента–Вяйсяля для сжимаемых течений, включающей в себя зависимость как от исходного профиля плотности, так и от исходного профиля давления. В приближении стандартной f -плоскости найдены сжимаемые магнитогравитационные, сжимаемые магнитострофические и сжимаемые магнитные инерционно-гравитационные волны. Их дисперсионные соотношения имеют вид, схожий с дисперсионными соотношениями для волн в приближении Буссинеска [1], а отличия содержатся в слагаемых с частотой Брента–Вяйсяля для сжимаемых течений. В приближении нестандартной f -плоскости сжимаемые магнитные инерционно-гравитационные и сжимаемые магнитострофические волны, схожие с волнами на стандартной f -плоскости, с отличием в слагаемых, описывающих вклад силы Кориолиса в динамику волн. Кроме того, найдены принципиально новые дисперсионные соотношения для магнитных инерционно-гравитационных волн. В приближении стандартной бета-плоскости найдены сжимаемые магнитогравитационные волны и сжимаемые трехмерные низкочастотные волны магнито-Россби. Дисперсионное соотношение для низкочастотных волн магнито-Россби переходит в аналогичное в приближении Буссинеска [1] при отсутствии горизонтального магнитного поля в состоянии покоя. Помимо новых типов волн, найдены волны Альфвена, и волны магнито-Россби аналогичные волнам в приближении Буссинеска. В приближении нестандартной бета-плоскости найдены сжимаемые магнитные инерционно-гравитационные аналогичные волнам на нестандартной f -плоскости, а также принципиально новые сжимаемые магнитные инерционно-гравитационные и магнитострофические волны. Также найдены трехмерные сжимаемые низкочастотные волны магнито-Россби, дисперсионное соотношение для которых не сводится к аналогичному в приближении Буссинеска [1]. Помимо новых типов волн, найдены волны магнито-Россби, аналогичные волнам в приближении Буссинеска [1].

В рамках исследования волновых процессов во вращающейся стратифицированной плазме в неупругом приближении была развита слабонелинейная теория: качественно исследованы дисперсионные кривые волн на наличие трехволновых взаимодействий, методом многомасштабных разложений получены амплитудные уравнения и найдены инкременты неустойчивостей типа распад и усиление.

Работа поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «Базис» и грантом РФФИ № 19-02-00016.

Литература

1. Федотова М.А., Петросян А.С. Волновые процессы в трехмерных стратифицированных течениях вращающейся плазмы в приближении Буссинеска // ЖЭТФ 2020 Т.158 (2) с. 374.

Модель образования неравновесного химического состава в оболочках одиночных нейтронных звёзд*А.Ю. Игнатовский^{1,2,3}, Г.С. Бисноватый-Коган^{1,4,5}*¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский институт)² Институт теоретической и экспериментальной физики, НИЦ «Курчатовский институт»³ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»⁴ Институт космических исследований РАН⁵ Московский инженерно-физический институт

Нейтронные звёзды являются результатом гравитационного коллапса в конце эволюции массивных звёзд. Плотности нейтронных звёзд порядка плотности атомного ядра $\sim 2 \cdot 10^{14}$ г см⁻³ во внутренних частях и составляют $\sim 10^9$ г см⁻³ на границе внешней оболочки. Молодые сформировавшиеся нейтронные звёзды с температурой $T > 10^{10}$ К быстро охлаждаются за счёт нейтринных потерь энергии в первые секунды жизни.

Результаты эволюции химического состава в различных системах предоставляют интерес для всей астрофизики. Хорошо известен ответ для медленной эволюции звёзд, когда в результате различных ядерных реакций образуются элементы группы железа, имеющие наибольшую энергию связи на нуклон 8.55 МэВ, и вплоть до более тяжёлых элементов типа платины и свинца. Процессы нуклеосинтеза были классифицированы в работе [1], где было установлено, что элементы тяжелее железа образовались в так называемых s- и r-процессах, процессы медленного и быстрого захвата нейтронов ядрами соответственно, с последующими за ними бета-распадами [2, 3].

В процессе остывания нейтронных звёзд в их оболочках образовывается слой с неравновесным химическим составом. Неравновесность заключается в избытке нейтронов, в которых запасено достаточное количество ядерной энергии, позволяющей поддерживать рентгеновскую светимость этих компактных объектов на протяжении десятков тысяч лет [4].

В работе рассмотрена эволюция оболочки одиночной горячей нейтронной звезды и представлена динамичная модель её эволюции. Благодаря нейтринным потерям энергии горячая нейтронная звезда с большой скоростью охлаждается, постепенно и неодновременно закрываются различные каналы ядерных реакций: сначала отключаются слияния тяжёлых заряженных ядер, затем исчезают реакции захвата протонов ядрами (вероятность туннелирования через кулоновский барьер падает с уменьшением температуры). Сравнительно быстро протекают ядерные реакции захвата нейтронов. При высоких плотностях электроны такого остывшего вещества сильно вырождены и заполняют сферу Ферми, позитроны отсутствуют. В зависимости от соотношения между энергией Ферми свободных электронов и энергий бета-распада различного сорта ядер, образованные за счёт присоединения нейтронов сверхтяжёлые ядра могут претерпеть либо бета-распад, либо бета-захват. В результате ядра аккумулируются в слое, ограниченном по Z и A .

Показано, что в предельных случаях образуются либо сверхтяжёлые изотопы (случай низкой плотности, рис. 1), либо лёгкие элементы с $Z \leq 6$ (случай высокой плотности, рис. 2). Во всех случаях изотопы лежат вблизи границы существования ядер $A = 3.4Z$.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 21-12-00061.

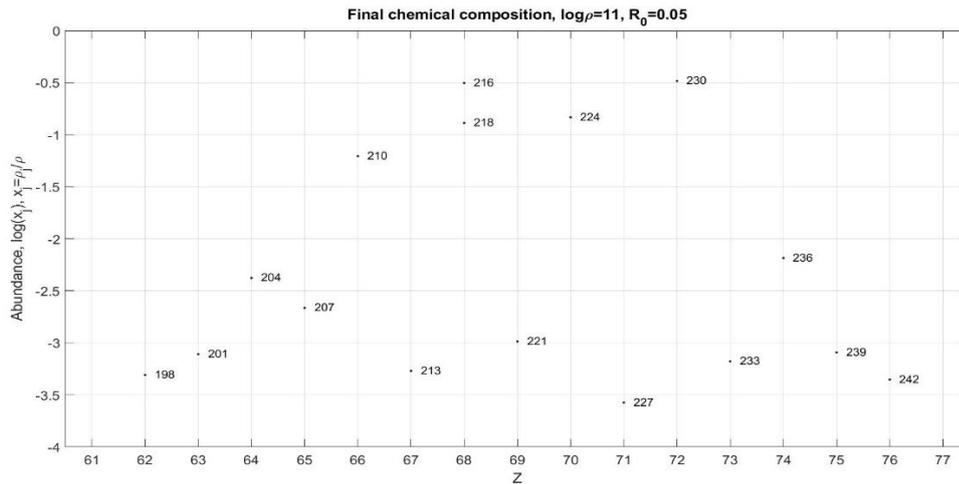


Рис. 1. Массовые доли итогового химического состава при начальной плотности $10^{11} \text{ г см}^{-3}$, температуре 10^{10} К и отношения общего числа протонов к нейтронам $R_0=0.05$ в зависимости от атомного зарядового числа Z. Маркеры пронумерованы атомными массовыми числами изотопов A

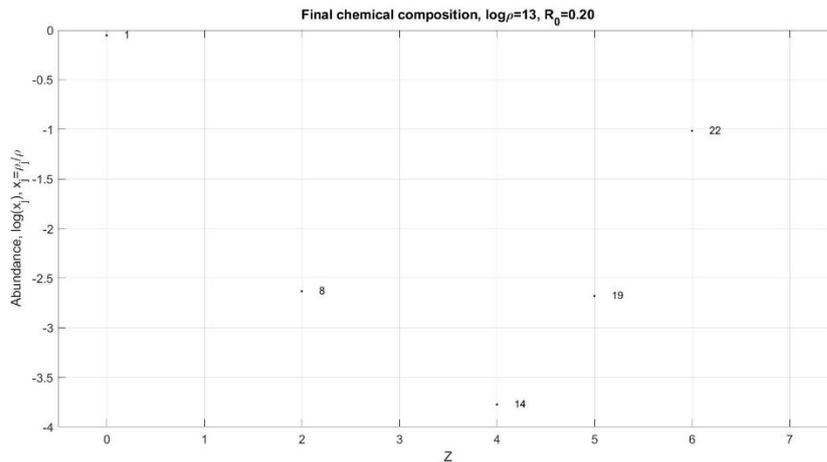


Рис. 2. Массовые доли итогового химического состава при начальной плотности $10^{13} \text{ г см}^{-3}$, температуре 10^{10} К и отношения общего числа протонов к нейтронам $R_0=0.20$ в зависимости от атомного зарядового числа Z. Маркеры пронумерованы атомными массовыми числами изотопов A

Литература

1. Burbidge E.M., Burbidge G.R., Fowler W.A., Hoyle F., Synthesis of the Elements in Stars // Reviews of Modern Physics 1957. V. 29 P. 547.
2. Cameron A.G.W., The Heavy Element Yields of Neutron Capture Nucleosynthesis // Astrophysics and Space Science 1982. V. 82 P. 123.
3. Seeger P. A., Fowler W.A., Clayton D.D., Nucleosynthesis of Heavy Elements by Neutron Capture // Astrophysical Journal supplement 1965. V. 11 P. 121.
4. Bisnovatyi-Kogan G.S., Chechetkin V. M., Nucleosynthesis in supernova outbursts and the chemical composition of the envelopes of neutron stars // Astrophysics and Space Science 1974. V. 26 P. 3.

Локализованные пылевые звуковые волновые структуры в запыленной магнитосфере Сатурна

Д.В. Шохрин¹, С.И. Коннин^{1,2,3}, С.И. Попель^{1,2,3}

¹Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Институт космических исследований РАН

Рассмотрена возможность распространения локализованных волновых структур [1] таких, как пылевые звуковые солитоны в плазме запыленной магнитосферы Сатурна [2, 3], которая содержит подчиняющиеся каппа-распределению электроны двух сортов (горячие и холодные), ионы магнитосферы, а также заряженные пылевые частицы. Определены области возможных скоростей и амплитуд солитонов. Найдены солитонные решения для различных размеров и концентраций пылевых частиц в запыленной магнитосфере Сатурна.

На рис. 1–3 приведены результаты вычислений для следующих параметров плазмы магнитосферы Сатурна: $n_{i0}=10 \text{ см}^{-3}$, $T_i=100 \text{ К}$, $T_{ec}=10 \text{ эВ}$, $T_{eh}=700 \text{ эВ}$, $\alpha=0.5$, $\kappa_c=\kappa_h=2$. Здесь n_{i0} – невозмущенная концентрация ионов, T_i – температура ионов, $T_{ec(h)}$ – температура холодных (горячих) электронов, α – коэффициент соотношения между концентрациями холодных и горячих электронов, κ_c , κ_h – параметры каппа-распределений электронов.

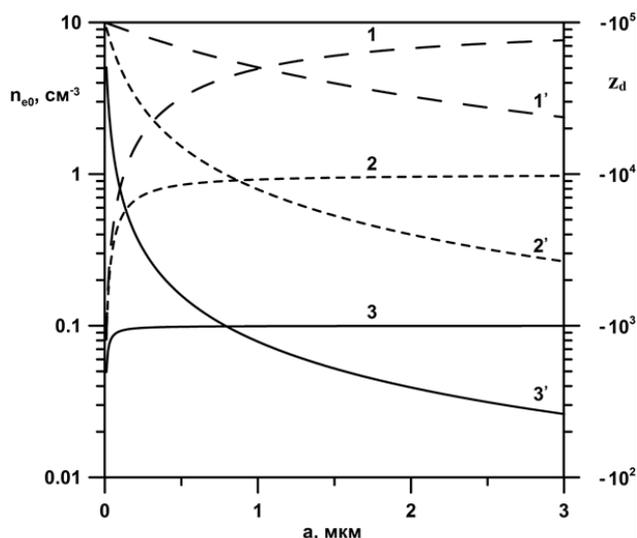


Рис. 1. Зависимости зарядовых чисел Z_d пылевых частиц (кривые 1–3), а также суммарных концентраций электронов n_{e0} (кривые 1'–3') от размеров пыли для различных концентраций пылевых частиц: $n_{d0} = 10^{-4}$ (кривые 1, 1'), 10^{-3} (кривые 2, 2'), 10^{-2} см^{-3} (кривые 3, 3')

Таким образом, существует возможность распространения локализованных волновых структур таких, как пылевые звуковые солитоны в запыленной плазме магнитосферы Сатурна. Оказывается, что во всей области определения амплитуды электростатического потенциала пылевых звуковых солитонов являются отрицательными. При этом абсолютные значения амплитуд могут быть достаточно большими (порядка T_i/e , где $-e$ – заряд электрона), что указывает на возможность наблюдения пылевых звуковых солитонов в магнитосфере Сатурна в будущих космических миссиях.

Данная работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

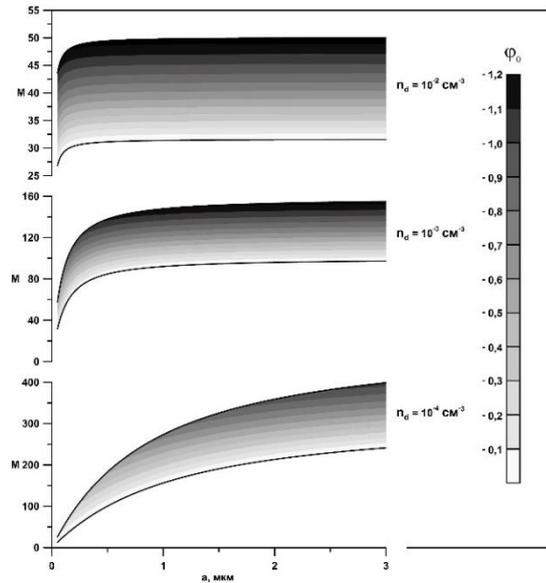


Рис. 2. Амплитуды ϕ_0 пылевых звуковых солитонов в зависимости от размеров пылевых частиц в зависимости от безразмерной скорости солитона M при $n_{d0} = 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2} \text{ см}^{-3}$. Жирные линии соответствуют границам разрешенных областей

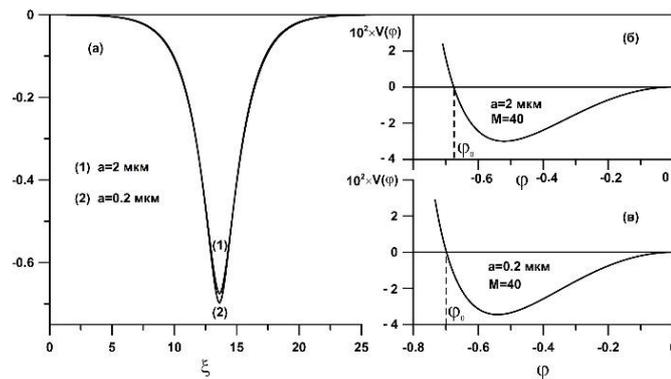


Рис. 3. Пылевые звуковые солитоны (а) и соответствующие им сагдеевские потенциалы (б) и (в) для случая $n_{d0} = 10^{-2} \text{ см}^{-3}$, $M = 40$. Солитон (1) соответствует размерам пылевых частиц $a = 2 \text{ мкм}$. Солитон (2) соответствует размерам пылевых частиц $a = 0.2 \text{ мкм}$

Литература

1. Сагдеев П.З. Коллективные процессы и ударные волны в разреженной плазме // Вопросы теории плазмы. Под ред. М.А. Леонтовича. Вып. 4. М.: Атомиздат, 1964, С. 20–80.
2. Wahlund J.-E., André M., Eriksson A.I.E., Lundberg M., Morooka M.W., Shafiq M., Averkamp T.F., Gurnett D.A., Hospodarsky G.B., Kurth W.S., Jacobsen K.S., Pedersen A., Farrell W., Ratynskaia S., Piskunov N. Detection of dusty plasma near the E-ring of Saturn // Planet. Space Sci. 2009. V. 57. P. 1795.
3. Yaroshenko V. V., Ratynskaia S., Olson J., Brenning N., Wahlund J.-E., Morooka M., Kurth W.S., Gurnett D.A., Morfill G.E. Characteristics of charged dust inferred from the Cassini RPWS measurements in the vicinity of Enceladus // Planet. Space Sci. 2009. V. 57. P. 1807.

Моделирование поляризационной структуры релятивистских выбросов квазаров

Р.В. Тодоров¹, Е.В. Кравченко^{1,2}, И.Н. Пащенко^{2,1}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

В данной работе представлены наши первые результаты компьютерного моделирования переноса поляризованного излучения в радио диапазоне от протяженных релятивистских струй квазаров, представляющих собой активные ядра галактик (АЯГ).

В современном представлении магнитное поле играет ключевую роль в АЯГ при формировании, распространении и коллимации струй как в непосредственной близости от сверхмассивных черных дыр, так и на больших масштабах [1]. Поляризованное излучение, главным источником которого в струях АЯГ является синхротронное излучение, является по сути единственной возможностью исследования магнитных полей, элементарного состава и энергетического спектра частиц как вещества струй, так и окружающей их плазмы. Существенную роль в этом играет Фарадеевское вращение, учет и анализ которого позволяет сделать выводы о свойствах, распределении и плотности вещества в окрестности струй квазаров, а также о свойствах плазмы внутри струи. Привлекая разные модели струй и сравнивая их предсказания с реальными астрономическими наблюдениями, мы можем определить внутреннюю поляризационную структуру струй.

В нашей работе трехмерная модель струи квазара создается на основе предполагаемых профилей концентрации частиц, их скорости, величины и конфигурации магнитного поля, а также частоты наблюдения (2–43 ГГц), расстояния и угла наблюдения источника. При этом используется степенной энергетический спектр частиц. Картиная плоскость реализуется в виде сетки, из каждого участка которого пускается луч, вдоль которого численно решаются уравнения переноса. По итогу мы получаем карту для каждого из параметров Стокса (I, Q и U), что позволяет нам получить как распределение полного, так и линейно поляризованного излучения (рис. 1). В процессе мы также строим карты Фарадеевской меры вращения и оптической толщины.

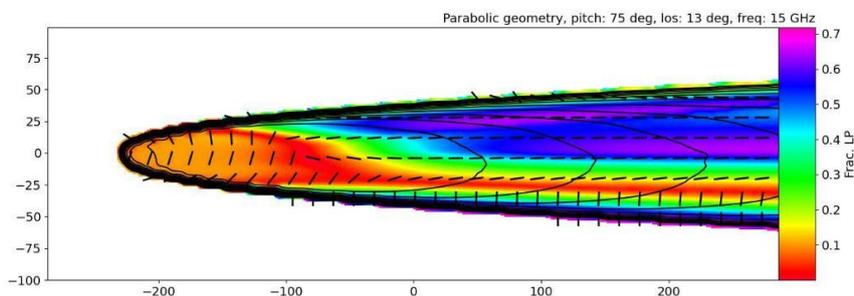


Рис. 1. Пример синтезированной карты поляризованного излучения в релятивистской струе квазара параболической формы, со спиральным магнитным полем (питч-угол 75°), углом к лучу зрения 13° на частоте 15 ГГц (углы даны в системе отсчета, связанной с источником). Цветом обозначена величина степени линейной поляризации, черными контурами – уровни полной интенсивности. Короткие черточки показывают направление поляризации. Десять пикселей соответствуют одной угловой миллисекунде дуги

Корректность созданного пакета моделирования и задаваемых параметров струй была протестирована на простой модели, предполагающей постоянное спиральное магнитное поле и концентрацию частиц вдоль струи. Для этого питч-угол магнитного поля и угол наблюдения струи менялся в широком интервале (от продольной к тороидальной конфигурации, от малого к большому наклону струи к лучу зрения). Наши результаты показали хорошее согласие с аналитическими расчетами [2]. В будущем мы планируем воспроизвести разнообразные профили поляризованного излучения струй других АЯГ, таких как 3C 345, BL Lac и 3C 454.3, включая моделирования радиоинтерферометрических наблюдений синтезированных карт.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 20-72-10078.

Литература

1. *Zamaninasab M., Clausen-Brown E., Savolainen T., Tchekhovskoy A.* Dynamically important magnetic fields near accreting supermassive black holes // *Nature* 2014. V. 510. P. 126.
2. *Murphy E., Cawthorne T.V., Gabuzda D.C.* Analysing the transverse structure of the relativistic jets of active galactic nuclei // *Mon. Not. R. Astr. Soc.* 2013. V. 430. P. 1504.

Эволюция необычного квазара 0858-279 с пиковой формой радиоспектра на парсековых масштабах

Н.А. Косогоров^{1,2}, Ю.Ю. Ковалев^{2,1}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Мы подробно изучили далекий квазар 0858-279 с пиковой формой радиоспектра. В ранних обзорах РСДБ данный источник продемонстрировал протяженную структуру. При этом его спектр, который был получен на РАТАН-600, показал сильную и быструю переменность. В силу принципа причинности соответствующее время переменности не соответствовало наблюдаемому размеру источника.

Чтобы разрешить это несоответствие, мы произвели наблюдения этого квазара на системе радиотелескопов VLBA на четырех эпохах (ноябрь 2005, февраль, май и август 2007; подробности по первой эпохе см. <https://arxiv.org/abs/2104.08544>) и шести частотах в диапазоне от 1.4 до 22.2 ГГц. Высокое разрешение VLBA на частотах 15 и 22 ГГц, а также восстановленные карты спектральных индексов (рис. 1) предоставили подробную информацию о структуре источника. Яркая деталь джета оказалась расположена в 20 парсеках от слабого ядра. Мы оценили магнитное поле в этой детали и обнаружили, что оно необычно сильное, около 6 Гс. Кроме этого, многоэпоховые наблюдения позволили определить, что источником переменности является яркая деталь джета (рис. 2) Мы также изучили поляризационные свойства квазара. Высокие значения меры вращения (6000 рад/м² в 2005 и 1000 рад/м² в 2007), указали на то, что джет взаимодействует с окружающей средой. Благодаря данному взаимодействию могло произойти образование стоячей ударной волны. При этом эволюция структуры источника, направления магнитного поля и сильное изменение значений меры вращения показали, что наиболее вероятно в 2005 году происходит взаимодействие стоячей и движущейся ударной волны, которое усиливает излучение в данном месте джета.

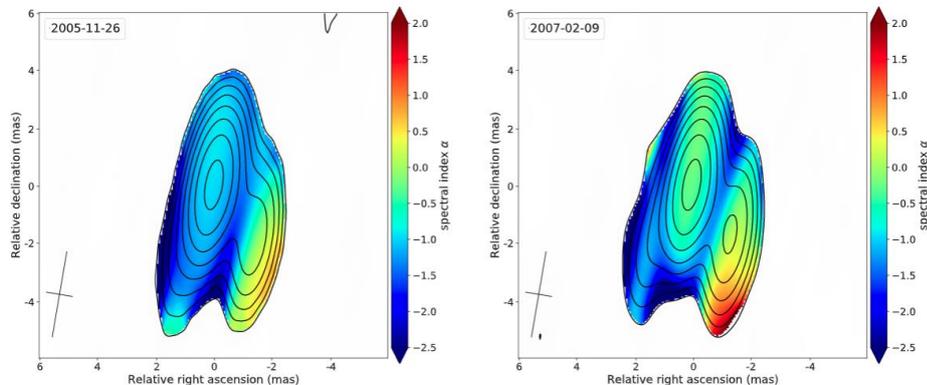


Рис. 1. Карты спектрального индекса для 22–15 ГГц на двух эпохах наблюдений, ноябрь 2005 (слева) и февраль 2007 (справа). На картах показаны контуры полной интенсивности на 22.2 ГГц, а также значения спектрального индекса. В квазаре наблюдаются ярко выраженный регион с инвертированным спектром, в котором значения спектрального индекса становятся положительными и который можно отождествить с ядром. В левом нижнем углу крестом показаны параметры диаграммы направленности

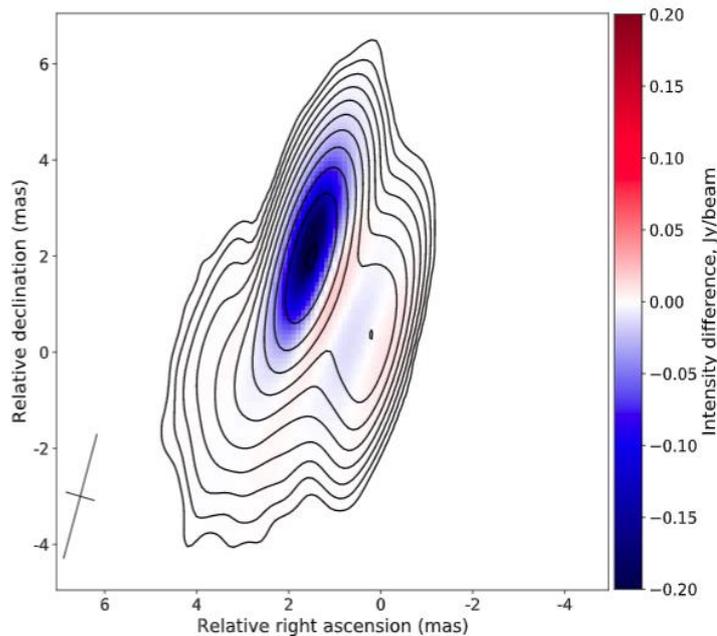


Рис. 2. Разница между картами полной интенсивности между февралем 2007 и ноябрем 2005. На карте показаны контуры полной интенсивности на 22.2 ГГц, взятые с данных 2005 года. В левом нижнем углу крестом показаны параметры диаграммы направленности. Практически вся переменность в излучении локализована в центральной области карты, которая соответствует детали джета

Литература

1. Kovalev Y.Y., Kovalev Yu.A., Nizhelsky N.A., Bogdantsov A.B. Broad-band Radio Spectra Variability of 550 AGN in 1997–2001 // *Astron. Soc. Aust.*, 2002, 19, 83–87.
2. Slish V. I. *Angular Size of Radio Stars* // *Nature*, 1963, 199, 682.
3. Marscher A.P. Accurate formula for the self-Compton X-ray flux density from a uniform, spherical, compact radio source // *Astrophysical Journal*, January 1983, 264:296–297.

УДК 521.11

Метод Тремейна–Вайнберга: насколько мы можем доверять газовым индикаторам спиральной структуры?

О.И. Бородина^{1,2}, Т. Уильямс³

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт астрономии РАН

³Max Planck Institut für Astronomie, Heidelberg, Germany

Вопрос о природе и характере эволюции спиральной структуры галактик до сих пор считается открытым. Общепринятой теорией на сегодняшний день является распространение волн плотности, которые вызывают вспышки звездообразования в газе [1]. Одной из ключевых характеристик в теории волн плотности является угловая скорость спиральной структуры. Однако эта величина не может быть напрямую измерена, так как она не равна скорости вращения объектов, таких как звезд или газовых облаков. Одним из методов, которые позволяют определить скорость спирального узора является метод Тремейна–Вайнберга. Этот метод был выведен аналитически в статье Тремейна и Вайнберга [2] в 1984 году и стал очень популярен ввиду легкости в применении.

Метод основывается на трех предположениях:

- Галактика представляет собой плоский диск
- Диск имеет один и хорошо выделяемый спиральный узор (бар)
- Индикатор (tracer) должен подчиняться уравнению непрерывности.

Метод основывается на величинах, таких как поверхностная яркость индикатора (газ или маломассивные звезды) и лучевая скорость индикатора, которые получаются из спектроскопических и фотометрических наблюдений, поэтому его применяют как к отдельным галактикам, так и к целым группам. Однако в последние годы вышли статьи, для которых метод Тремейна–Вайнберга дает физически неправдоподобные результаты (например, сверхбыстрые бари [3]) или различные значения скорости бари при применении метода к разным газовым индикаторам [4]. Главной проблемой является то, что для наблюдательных данных у нас нет способа проверить достоверность результатов, поэтому следует изучить этот метод на смоделированных галактиках.

Таким образом, целью данной работы является применение метода Тремейна–Вайнберга к нескольким симуляциям газа в галактике с баром и сравнить полученные результаты со значением угловой скорости бари в них.

В ходе работы мы использовали одну двумерную модель галактики с баром (рис. 1), одну трехмерную, а также две тестовых нефизичных модели: плоский твердотельный диск и диск с различными значениями твердотельного вращения в области бари и за ним.

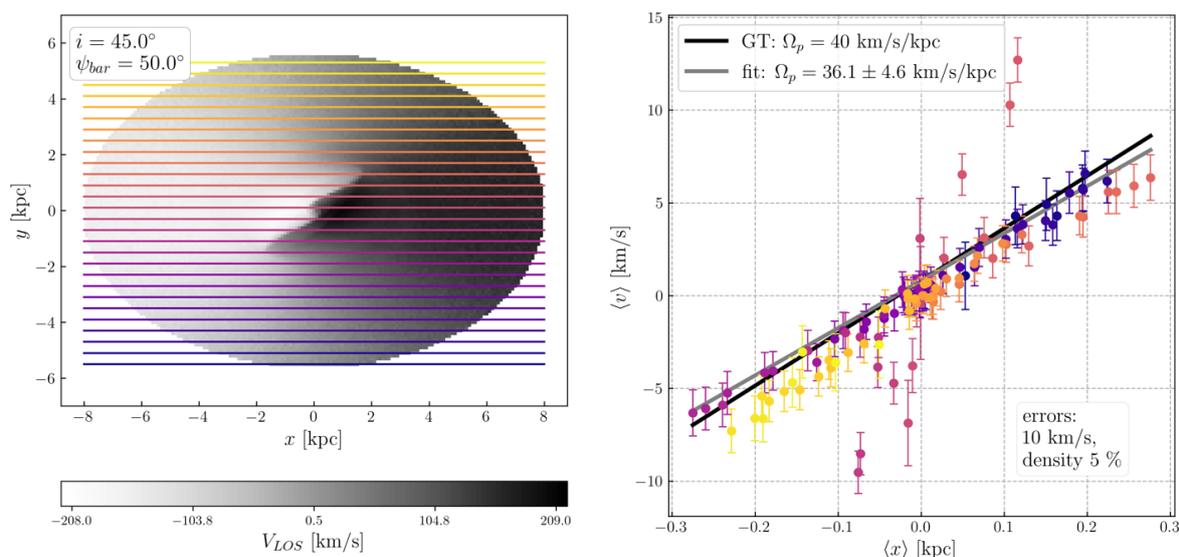


Рис. 1 Применение метода Тремейна–Вайнберга к модели галактики. Левая панель: карта лучевых скоростей (черно-белый фон) и щели, вдоль которых ведется интегрирование (отображена каждая четвертая линия). Правая панель: Взвешенные скорость и координата для соответствующих щелей. Черная линия показывает значение угловой скорости для модели, серая – результат фиттирования

Мы получили, что метод очень чувствителен к различным видам несовершенств данных: к неопределенности положения линии наклона галактики, к шуму в данных плотности, а также к отсутствию симметризации данных. Для углов n наклона i , меньших 7 градусов, мы не можем пользоваться методом, так как лучевая скорость сравнима с ошибками ее определения. Более того, для углов наклона i , больших чем 45 градусов, метод начинает воспринимать твердотельную составляющую вращения галактики как скорость спиральной структуры. Также имеет значение угол между баром и главной полуосью галактики. Для углов 0, 90 и 180 градусов, или когда бар сонаправлен с большой или малой полуосью эллипса галактики, метод также не способен выдать правильный результат.

Работа выполнена при поддержке Max Planck Group в рамках программы летней стажировки в Max Planck Institut für Astronomie (MPIA).

Литература

1. *Lin, C.C.; Shu, F.H.* On the Spiral Structure of Disk Galaxies, II. Outline of a Theory of Density Waves // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 1966, V. 55, P. 229–234
2. *Tremaine, S.; Weinberg, M.D.* A kinematic method for measuring the pattern speed of barred galaxies // Astrophysical Journal, V. 282, P. L5–L7.
3. *Cuomo, V. et al.* Bar pattern speeds in CALIFA galaxies. III. Solving the puzzle of ultrafast bars // Astronomy & Astrophysics, V. 649, 19 P.
4. *Williams T.G. et al.* Applying the Tremaine-Weinberg Method to Nearby Galaxies: Stellar-mass-based Pattern Speeds and Comparisons with ISM Kinematics // The Astronomical Journal, V. 161, 21 P.

К вопросу о влиянии заряженных частиц диоксида углерода на свойства ионосферы Марса

Ю.С. Резниченко^{1,2}, А. Ю. Дубинский¹, Ю. Н. Извекова^{1,2}, С. И. Попель^{1,2,3}

¹Институт комических исследований РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

В работе представлена теоретическая модель, описывающая возможный механизм формирования и эволюции плазменно-пылевых облаков, зафиксированных в марсианской ионосфере аппаратом Mars Science Laboratory Curiosity в марте 2021 года. В основу модели легли идеи, изложенные в [1–6], некоторые экспериментальные данные были взяты из [7–12]. Модель включает в себя систему уравнений, описывающую седиментацию пылевых частиц в пересыщенных парах углекислого газа, увеличение масс и размеров пылевых зародышей за счет нуклеации углекислого газа, процессы зарядки пылевых частиц, а также временные изменения электронной и ионной концентраций ионосферной плазмы. Численный анализ используемой системы уравнений позволяет сделать следующие выводы.

1) Характерное время седиментации пылевого облака составляет порядка 400–600 секунд. В ходе седиментации все частицы облака достигают характерных размеров порядка 0,3–3,5 микрон.

2) Величина и знак приобретаемого частицей заряда зависят от наличия или отсутствия фотоэффекта. При отсутствии фотоэффекта (ночной случай) частицы приобретают отрицательный заряд, характерная величина которого составляет $|Z_d| \sim 10e$. В случае наличия фотоэффекта (дневной случай) частицы, имеющие в своем составе металлические примеси, приобретают положительный заряд, характерная величина которого равна $|Z_d| \sim 100e$.

3) При отсутствии фотоэффекта наблюдается понижение концентраций электронов и ионов ионосферной плазмы при седиментации пылевого слоя за счет их дополнительной рекомбинации на поверхности пылевых частиц. При наличии фотоэффекта в случае, когда в составе частиц пылевого слоя имеются металлические примеси, наблюдается повышение электронной концентрации за счет появления фототока, концентрация ионов при этом по-прежнему понижается.

Кроме того, в работе исследуется возбуждение и распространение электростатических волн в ионосферной плазме Марса (см. [13–14]). Найдены закон дисперсии пылевых звуковых волн и инкремент их раскочки в рассматриваемых условиях.

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

Литература

1. Klumov B.A., Popel S.I., Bingham R. Dust Particle Charging and Formation of Dust Structures in the Upper Atmosphere // Письма в ЖЭТФ. 2000. Т. 72. С. 524.
2. Клумов Б.А., Морфилл Г.Е., Попель С.И. Формирование структур в запыленной ионосфере // ЖЭТФ. 2005. Т. 127. С. 171.
3. Дубинский А.Ю., Попель С.И. Формирование и эволюция плазменно-пылевых структур в ионосфере // Письма в ЖЭТФ. 2012. Т. 96. С. 22.
4. Дубинский А.Ю., Резниченко Ю.С., Попель С.И. К вопросу о формировании и эволюции плазменно-пылевых структур в ионосферах Земли и Марса // Физика плазмы. 2019. Т. 45. С. 913.
5. Yu.S. Reznichenko, A.Yu. Dubinskii, and S.I. Popel On dusty plasma formation in Martian ionosphere // Journal of Physics: Conference Series. 2020. V. 1556. Art. 012072.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Часть 1. М.: Наука, 1976. 584с.
7. Delgado-Bonal A., Zorzano M-P., Mart'in-Torres F.J. Martian Top of the Atmosphere 10–420 nm spectral irradiance database and forecast for solar cycle 24 // Solar Energy. 2016. V. 134. P. 228.
8. Bertaux J-L. [et all] SPICAM on Mars Express: Observing modes and overview of UV spectrometer data and scientific results // J. Geophys. Res. 2006. V. 111. E10S90.
9. Bertaux J-L. [et all] SPICAM: studying the global structure and composition of the Martian atmosphere // ESA Special Publication. 2004. V. 1240. P. 95.
10. Christou A., Vaubaillon J., Withers P., Hueso R., Killen R // Earth and Planetary Astrophysics. Cambridge University Press. 2019. P. 119.
11. Извекова Ю.Н., Попель С.И. Плазменные эффекты в пылевых вихрях у поверхности Марса // Физика плазмы. 2017. Т. 43. С. 1010.

12. Forget F., Montmessin F., Bertaux J.L., Gonz'alez-Galindo F., Lebonnois S., Qu'emeris E., Reberac A., Dimarellis E., L'opez-Valverde M.A. The density and temperatures of the upper martian atmosphere measured by stellar occultations with Mars Express SPICAM // *J. Geophys. Res.* 2009. V. 114. P. 01004.
13. Попель С.И., Морозова Т.И. Волновые процессы при взаимодействии хвоста магнитосферы Земли с пылевой плазмой у поверхности Луны // *Физика плазмы.* 2017. Т. 43. С. 474.
14. Извекова Ю.Н., Резниченко Ю.С., Попель С.И. О возможности существования пылевых звуковых возмущений в ионосфере Марса // *Физика плазмы.* 2020. Т. 46. С. 1119.

УДК 523.42

Эффективная параметризация поглощения УФ-излучения в атмосфере Венеры

М.В. Разумовский¹, Б.А. Фомин², А.В. Родин^{1,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Центральная аэрологическая обсерватория

³Институт космических исследований РАН

В работе была создана эффективная параметризация газового поглощения, а также поглощения неизвестного УФ-поглотителя в атмосфере Венеры в ультрафиолетовой части спектра 125–400 нм. Основная потребность в создании таких параметризаций связана как с невозможностью использования прецизионных line-by-line расчетов в климатических моделях общей циркуляции, так и нехваткой быстрых радиационных блоков в научном сообществе как таковых. Тем не менее, эталонные модели, основанные на медленных line-by-line расчетах необходимы для валидации грубых расчетов, основанных на вышеуказанных параметризациях. Эталонная модель, использованная в работе, основана на решении уравнения переноса излучения методом Монте-Карло и успешно применялась ранее для земных условий [1, 2]. Получение эффективных сечений для газового поглощения основано на применении метода k-distribution [3].

В процессе моделирования указанный спектральный интервал естественным образом был разделен на три части: F-UV (125–200 нм), M-UV (200–300 нм) и N-UV (300–400 нм). В F-UV части спектра сечения поглощения всех газов принимают наибольшие значения, однако за счет относительных концентраций CO₂ реальным вкладом других газов в совокупную оптическую толщину можно пренебречь. За счет малой порции солнечного излучения в F-UV удалось запараметризовать всё газовое поглощение при помощи одного эффективного сечения, рассчитанного только для углекислого газа. В M-UV части спектра оказалось необходимым учитывать вклад как от CO₂, так и от SO₂ (по одному эффективному сечению на каждый газ на весь диапазон M-UV). Хорошее соответствие в результатах моделирования нисходящих и восходящих потоков в быстрых и эталонных расчетах для поглощения SO₂ в M-UV диапазоне можно увидеть на рис. 1. Малость восходящих потоков по отношению к падающим стала основной причиной возможности описания газового поглощения в среднем и дальнем УФ всего тремя эффективными сечениями. Аналогичным образом описывается и поглощение в N-UV диапазоне, в котором играет немалую роль неизвестный УФ-поглотитель наравне с SO₂. Однако сильное солнечное излучение и слабое поглощение в этом диапазоне привело к необходимости разбиения указанного интервала на более мелкие отрезки для улучшения точности быстрых расчетов.

В работе использовалась современная 4-модовая модель облака [4], причем отметим, что именно в УФ-диапазоне оптические свойства облака слабо меняются с длиной волны. Неизвестный УФ-поглотитель эффективно рассматривается как газ, с заранее заданными сечениями поглощения и концентрациями, при которых воспроизводится экспериментальное значение по спектральному альбедо планеты [5]. Мы также подбираем для каждого интервала разбиения соответствующую длину волны для расчета Рэлеевского рассеяния и оптических свойств облака. Более того, в F-UV диапазоне Рэлеевским рассеянием можно пренебречь, так как его эффективная толщина крайне мала по сравнению с оптической толщиной CO₂ на тех высотах, где поглощение еще полностью не произошло.

Главным итогом работы стала возможность ускорения примерно в 20–30 раз радиационных расчетов при применении настоящей параметризации по сравнению аналогичным методом ускорения расчетов [5]. Относительная гладкость спектров поглощения газовых составляющих и их независимость от температурных профилей приводит к тому, что указанный способ получения потоков и скоростей нагрева в атмосфере практически не зависит от выбора географической точки планеты. Широтная зависимость определяется изменениями в свойствах облачного слоя, который в УФ-диапазоне проявляет в основном только рассеивающие свойства (неизвестный УФ-поглотитель рассматривается

независимо), и таким образом учитывается независимо от газового поглощения. Дальнейшая работа над быстрым радиационным блоком предполагается и в остальных частях спектра для создания параметризаций как солнечной, так и тепловой радиаций.

SO₂ atmospheric fluxes for 33333-50000 cm⁻¹

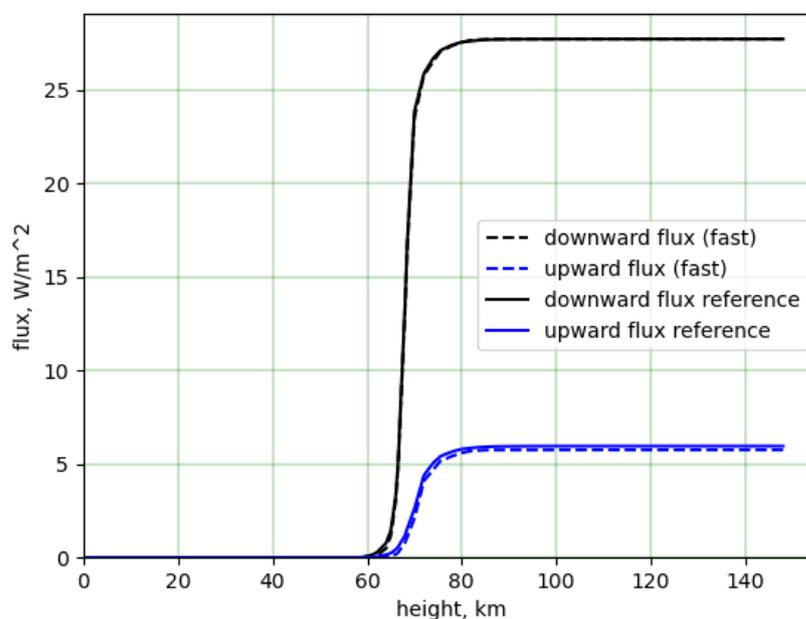


Рис. 1. Восходящие и нисходящие потоки излучения в венерианской атмосфере, полученные в быстрых и эталонных расчетах для SO₂ в M-UV диапазоне. Рэлеевское рассеяние и оптические свойства облака в быстрых расчетах были подобраны для волнового числа 36000 cm⁻¹

Литература

1. *Fomin B.* A k-distribution technique for radiative transfer simulation in inhomogeneous atmosphere: 1. FKDM, fast k-distribution model for the longwave // *Journal of geophysical research: atmospheres.* 2004, 109(2).
2. *Fomin B., de Paula Correa M.* A k-distribution technique for radiative transfer simulation in inhomogeneous atmosphere: 2. FKDM, fast k-distribution model for the shortwave // *Journal of geophysical research D: atmospheres.* 2005, 110(2), P. 1–10.
3. *Fomin B.A.* Method for parametrization of gas absorption of atmospheric radiation giving the k-distribution with minimum number of terms // *Atmospheric and oceanic optics.* 2003. 16(3), 244–246.
4. *Haus R., Kappel D., Arnold G.* Self-consistent retrieval of temperature profiles and cloud structure in the northern hemisphere of Venus using VIRTIS/VEX and PMV/Venera-15 radiation measurements //
5. *Haus R., Kappel D., Arnold G.* Radiative heating and cooling in the middle and lower atmosphere of Venus and responses to atmospheric and spectroscopic parameter variations // *Planetary and space science.* 2015. 117, 262–294.

УДК 52-732 524.3-59

Исследование фона детектора SPI-ACS космической обсерватории INTEGRAL

Г.Ю. Мозгунов^{1,2}, А.С. Позаненко^{1,2}, П.Ю. Минаев^{1,2}, И. В. Человеков², С.А. Гребенев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт космических исследований РАН

В работе приводятся результаты долговременных исследований космического фона, регистрируемого детектором SPI-ACS на борту космической обсерватории INTEGRAL. Исследования включают в себя изучение поведения фонового сигнала на различных временных масштабах, исследование вклада в фон различных компонент (гамма-излучения, протонов, электронов), поиск крупномасштабных вариаций фона. Всё это необходимо как для построения модели фона для высокоорбитальных космических миссий, так и для поиска длительных астрофизических гамма-транзиентов (например, гамма-всплесков с продлённым излучением [1]). Аналогичные работы ранее проводилась для других детекторов, космического базирования, например: GBM/Fermi [2], BAT/Swift [3], SPI/INTEGRAL [4].

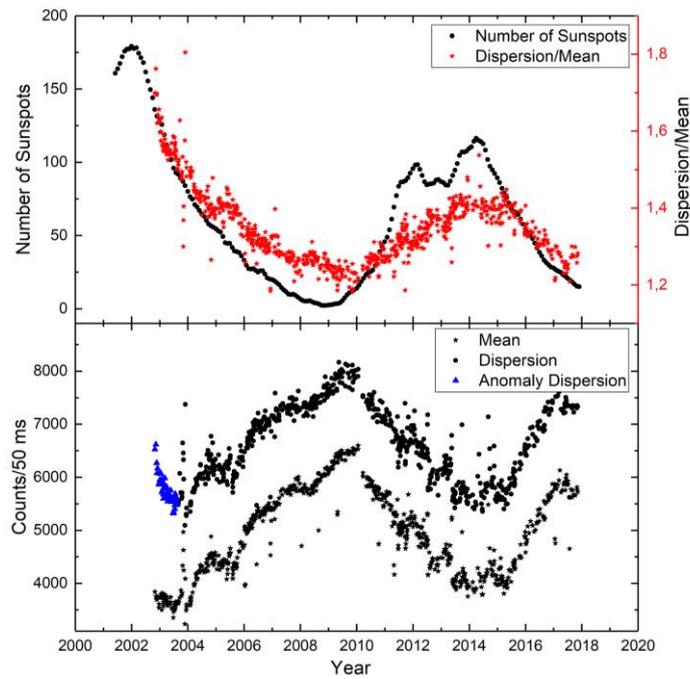


Рис. 1 Зависимость параметров фона от эпохи наблюдения. Сверху: количество Солнечных пятен (чёрные кружки) и параметр k (красные звёзды). Снизу: среднее и выборочная дисперсия (чёрный), синими треугольниками указаны anomальные значения дисперсии

В работе использованы данные антисовпадательной защиты SPI-ACS – детектора на основе сцинтилляционных кристаллов BGO, работающих в диапазоне энергий 80 – 10000 кэВ и обладающей полем зрения почти 4π. Для калибровки вклада протонов и электронов были использованы данные детектора IREM, также расположенного на борту INTEGRAL. Детектор заряженных частиц IREM регистрирует электроны и протоны с энергиями более 1 МэВ и 12 МэВ, соответственно. Космическая обсерватория INTEGRAL находится на высокоэллиптической орбите и большую часть времени проводит вне радиационных поясов [5]. Это позволяет исследовать фон и построить аналитические модели эволюции фона на масштабах вплоть до суток.

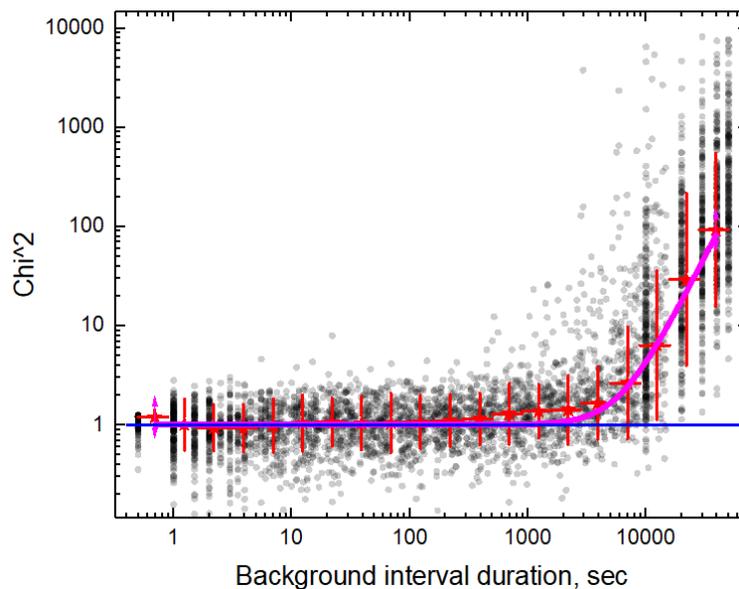


Рис. 1. Зависимость значения функционала χ^2 для линейной модели фона от длительности фонового интервала. Синей горизонтальной линией показано значения функционала равное единице. Красными точками показаны средние значения и разброс точек, сгруппированных по длительности интервала. Фиолетовая кривая показывает аппроксимацию степенной функцией с изломом

Одной из целей работы является изучение крупномасштабного поведения фона на высокоэллиптических орбитах. На рис. 1 представлена зависимость среднего, выборочной дисперсии, а также отношения этих параметров от эпохи наблюдения. Дополнительно на эти графики наложено среднемесячное число Солнечных пятен. Между ней и средним очевидно, наблюдается антикорреляция. Она может быть объяснена тем, что подавляющий вклад в фоновый сигнал SPI-ACS вносят галактические космические лучи (ГКЛ) [см. напр., 6]. Отношение выборочной дисперсии к среднему скоррелировано с Солнечной активностью и изменяется в диапазоне [1.2–1.8]

Проведено изучение применимости моделей фона на различных временных масштабах. На рис. 2 представлены результаты аппроксимации фона линейной моделью для различных длительностей интервала исследований фона. Анализ полученной зависимости позволяет определить масштаб времени, на котором конкретная модель может эффективно описывать поведение фона.

Литература

1. *Мозгунов Г.Ю.* [и др.]. Продленное излучение космических гамма-всплесков, зарегистрированных экспериментом SPI-ACS/INTEGRAL // Письма в Астрон. журн. 47(03):183–196 (2021).
2. *Biltzinger B. et al.* A physical background model for the Fermi Gamma-ray Burst Monitor // *Astron. Astrophys.*, 640, A8 (2020).
3. *Ajello M. et al.* Cosmic X-Ray background and Earth albedo spectra with Swift // *The Astrophysical Journal*, 689, 666–677 (2008).
4. *Diehl R. et al.* INTEGRAL/SPI γ -ray line spectroscopy Response and background characteristics // *Astron. Astrophys.*, 611, A12 (2018).
5. *Vedrenne G. et al.* SPI: The spectrometer aboard INTEGRAL // *Astron. Astrophys.*, 411, L63–L70 (2003).
6. *Potgieter M. S.*, Solar Modulation of Cosmic Rays // *Living Reviews in Solar Physics*, 10, 3 (2013).

УДК 537.86/87

Самосогласованное описание резонансного взаимодействия электронов с сигналом наземного ОНЧ-передатчика

А.А. Лужковский, Д.Р. Шкляр

Институт космических исследований РАН

В данной работе проведено исследование резонансного взаимодействия электронов радиационных поясов Земли с монохроматическими сигналами наземных ОНЧ-передатчиков в предположении их дактированного [1] распространения. Во многих исследованиях в указанном направлении нелинейная динамика частиц описывалась в приближении заданного поля, когда поле сигнала передатчика полагалось заданным и не учитывалось обратное влияние резонансных частиц на поле волны. Такой подход хоть и позволяет описать питч-угловую диффузию и ускорение части резонансных электронов, но не является самосогласованным. В настоящей работе развивается подход к самосогласованному описанию резонансного взаимодействия электронов с монохроматическими сигналами наземных ОНЧ передатчиков, распространяющимися в магнитосфере Земли в дактированном режиме. На основе метода последовательных приближений построен сходящийся итерационный процесс, результатом которого является профиль амплитуды волны вдоль лучевой траектории.

Мы полагаем, что сигнал передатчика с частотой $f = 10$ кГц распространяется вдоль силовой линии, соответствующей L -оболочке 3. В магнитосфере Земли сигнал распространяется в виде правополяризованной свистовой волны. Мы исследуем взаимодействие электронов с такой волной, считая внешнее магнитное поле Земли B_0 дипольным. Дисперсия и групповая скорость волны определяются «холодной» составляющей плазмы.

В случае дактированного распространения резонансное взаимодействие происходит только на первом циклотронном резонансе, когда продольная скорость частицы v_{\parallel} близка к значению резонансной скорости $v_R = (\omega - \omega_c)/k$. Здесь ω_c – электронная циклотронная частота, $\omega = 2\pi f$, k – модуль волнового вектора. Обозначим через $W = mv^2/2$ – кинетическую энергию электрона с массой m и скоростью v , а через $\mu = mv_{\perp}^2/2\omega_c$ – первый адиабатический инвариант, где $v_{\perp} = \sqrt{v^2 - v_{\parallel}^2}$. В отсутствие

волны величины μ и W остаются постоянными, в случае же резонансного взаимодействия, как известно [2], существует интеграл движения $W - \mu\omega \equiv C = \text{const} > 0$.

В нашей модели мы полагаем, что передатчик излучает постоянно и сигнал заполняет всю силовую трубку, поэтому уравнение на амплитуду волны записывается в стационарном случае. Для описания эволюции амплитуды электромагнитной волны вдоль лучевой траектории воспользуемся законом сохранения энергии в системе волна-резонансные частицы:

$$\frac{1}{\sigma} \frac{\partial(\sigma v_g U)}{\partial s} = 2\Gamma U \equiv -\langle \mathbf{j}_R \mathbf{E} \rangle, \quad U = \frac{B^2}{8\pi} \frac{\omega_c}{\omega_c - \omega},$$

где σ – поперечное сечение лучевой трубки, U – плотность энергии волны пропорциональная квадрату амплитуды магнитного поля волны, Γ – нелинейный инкремент свистовой волны, определяемый током резонансных частиц \mathbf{j}_R .

Уравнения движения резонансных электронов в поле свистовой волны, распространяющейся дактировано, и ленгмюровской волны имеют один и тот же вид и отличаются лишь определением нелинейного времени и параметра неоднородности. Поэтому, с помощью аналогии между ленгмюровскими и свистовыми волнами, нелинейный инкремент свистовой волны, распространяющейся дактировано, можно выразить через нелинейный инкремент ленгмюровской волны:

$$\Gamma = \Gamma_L \frac{\int_{W_{PR}}^{\infty} (C - W_{PR}) \left(\frac{\partial F_0}{\partial W} \right)_{C, W=W_R(C)} \frac{\gamma}{\gamma_L} dC}{\int_{W_{PR}}^{\infty} (C - W_{PR}) \left(\frac{\partial F_0}{\partial W} \right)_{C, W=W_R(C)} dC}.$$

Здесь Γ_L – линейный инкремент свистовой волны, $F_0 = F_0(W, C)$ – невозмущенная функция распределения, $W_{PR} = mv_R^2/2$ – продольная резонансная энергия, γ/γ_L – отношение нелинейного инкремента ленгмюровской волны к линейному инкременту. Поскольку выражение для нелинейного инкремента ленгмюровской волны хорошо известно [3], то это соотношение полностью определяет нелинейный инкремент свистовой волны.

В магнитосфере Земли плазма часто бывает неустойчивой, поэтому в вычислениях мы используем неустойчивую функцию распределения с конусом потерь:

$$F_0(W, C) = \frac{n_{heq}}{\pi v_T^3 I_\nu} \left(\frac{(W - C)\omega_{ceq}}{W\omega} \right)^\nu \exp\left(-\frac{W}{T_E}\right).$$

Здесь $v_T = \sqrt{2T_E/m}$ – характерная скорость горячих частиц, n_{heq} – значение плотности энергичных электронов на экваторе, ω_{ceq} – циклотронная частота на экваторе, $I_\nu = \sqrt{\pi} \Gamma(\nu + 1/2) / 2$, $\nu > 0$ – показатель конуса потерь. На рис. 1 представлена невозмущенная функция распределения для пяти различных значений C .

Нелинейный инкремент свистовой волны оказывается нелокальным и нелинейным функционалом амплитуды волны, поэтому для решения самосогласованной задачи мы используем метод последовательных приближений. На нулевом шаге итераций мы полагаем, что амплитуда волны определяется только геометрическими факторами, такими как поперечное сечение лучевой трубки и групповая скорость, без учета резонансного взаимодействия. На первом шаге итераций в этом поле мы вычисляем нелинейный инкремент свистовой волны и с помощью него, согласно уравнению на амплитуду волны, вычисляем новый профиль амплитуды волны. Далее эта операция продолжается до тех пор, пока амплитуда на « $n+1$ »-шаге не повторит амплитуду на « n »-шаге с заданной точностью. На рис. 2 представлены значения профиля амплитуды волны $h = B/B_0$, определяемый как отношение магнитного поля волны B к внешнему магнитному полю B_0 , на нулевом шаге итераций (синий цвет) и после 4-х шагов итерации (красный).

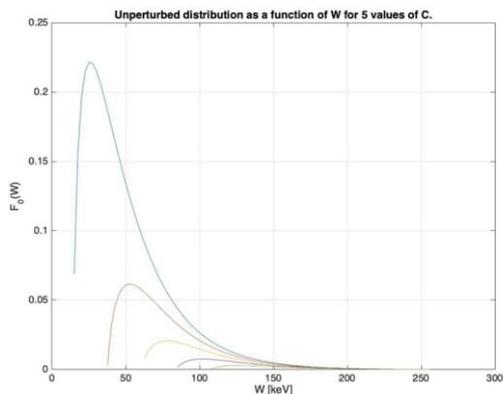


Рис. 1 Невозмущенная функция распределения как функция кинетической энергии W для пяти значений переменной $C=14, 37, 60, 84, 107$ кэВ

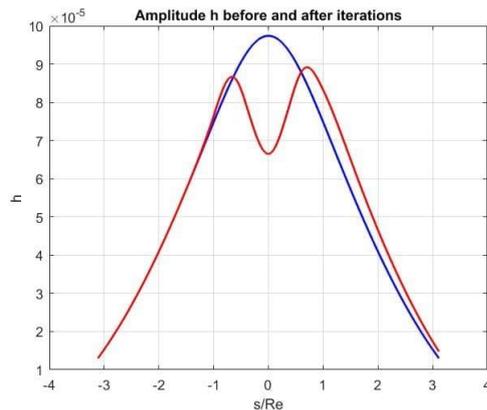


Рис. 2. Профиль амплитуды волны $h = B/B_0$ на нулевой итерации (синий) и после завершения итерационного процесса (красный)

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-02-00179.

Литература

1. *Helliwell R.A.* Whistlers and related ionospheric phenomena. Stanford, Calif: Stanford University Press, 1965.
2. *Karpman V. I., Istomin J.N., Shklyar D.R.* Nonlinear theory of a quasi-monochromatic whistler mode wave packet in inhomogeneous plasma // *Plasma Phys.* 1974a. V. 16. P. 685.
3. *Karpman V. I., Istomin J.N., Shklyar D.R.* Effects of nonlinear interaction of monochromatic waves with resonant particles in the inhomogeneous plasma // *Physica Scripta.* 1975. V. 11. P. 278.

УДК 524.7

Воспроизведение перехода от одногорбого к двугорбому профилю интенсивности излучения в ЗС 273

В.А. Фролова, Е.Е. Нохрина

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Релятивистские струйные выбросы (джеты) – это течения замагниченной плазмы из окрестностей сверхмассивных черных дыр в ядрах активных галактик [1]. Существенное улучшение разрешения в последние годы сделало возможным наблюдение их поперечной структуры. Так, оказалось, что возможны двугорбые и трёхгорбые поперечные профили интенсивности и спектрального индекса [2]. *Bruni et al.* [3] описывают двугорбый профиль интенсивности для ЗС 273 со следующей особенностью: при увеличении частоты наблюдения с 1.6 до 4.8 ГГц происходит переход к одногорбому профилю интенсивности; особенный интерес представляет близость значений использованных частот. Наша работа посвящена качественному воспроизведению такого перехода.

В работе моделируется синхротронное излучение с самопоглощением для цилиндрического релятивистского джета. Для этого мы рассматриваем модель джета, предложенную *Бескиным* [4]; для построения профилей интенсивности мы решаем уравнение переноса излучения [5].

В рамках рассматриваемой модели в джете имеется область, называемая центральным «кором» (central core), характеризуемая большими значениями магнитного поля и концентрации электронов. Отметим, что центральный кор является универсальным свойством моделей джетов [6, 7]. Если среда оптически прозрачна, то наличие такой области приводит к уярчению центральной части джета. С другой стороны, при уменьшении частоты наблюдения, в центральной части джета также значительно, чем в его краевых областях, возрастает оптическая толщина, благодаря чему возникает уярчение к краю. Однако для сопоставления с результатами наблюдений важно, чтобы такой переход был возможен именно для реалистичных параметров вычислений: для известных частот и угла наблюдения, для замагниченности, сопоставимой с измеренными скоростями в джете. Зафиксировав частоты и угол наблюдения, мы рассмотрели зависимости профилей интенсивности от параметров замагниченности

и расстояния от ядра, влияющих на симметричность профилей. Результаты нашего моделирования качественно соответствуют наблюдениям (рис. 1). Это означает, что такой переход действительно может быть следствием наличия центрального кора.

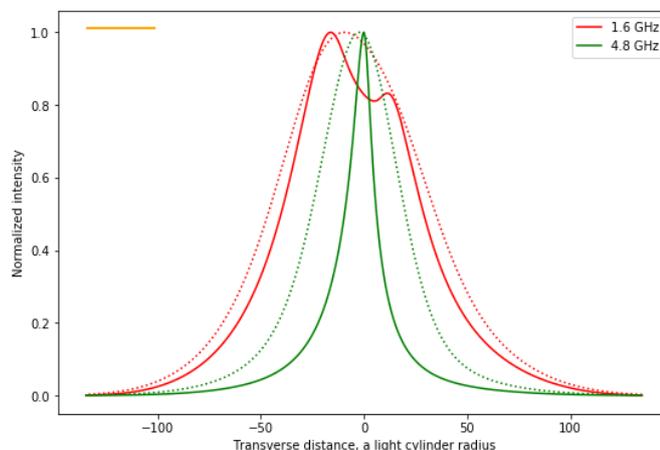


Рис. 1. Нормированная интенсивность излучения, вычисленная для частот наблюдения 1.6 и 4.8 ГГц. Сплошными линиями изображены теоретические профили, пунктирными – результат применения свёртки с диаграммой направленности. Её ширина на полувысоте приведена в верхнем левом углу

Укажем, какие особенности наблюдений пока не полностью отражены в моделировании. Во-первых, наблюдаемые поднятия более симметричны по амплитуде; это может быть объяснено тем, что профили в наблюдениях получены усреднением большого числа различных профилей вдоль джета, и потому наибольшие из потенциальных ошибок локализованы именно в поднятиях. Во-вторых, наблюдаемые поднятия более выражены, в то время как в моделировании двугорбый профиль после свёртки с диаграммой направленности может оказаться одногорбым. Такое расхождение может быть связано с недооценкой ширины джета. Мы исследуем возможности устранения указанных неточностей.

Литература

1. *Blandford R., Meier D., Readhead A.* Relativistic Jets from Active Galactic Nuclei // *ARA & A.* 2019. V. 57. P. 467–509.
2. *Mertens F., Lobanov A.P., Walker R.C., Hardee P. E.* Kinematics of the jet in M 87 on scales of 100–1000 Schwarzschild radii // *Astronomy & Astrophysics.* 2016. V. 595. A54.
3. *Bruni G., Savolainen T., Lobanov A., Gomez J.L., Kovalev Y., Fuentes A., Vega-Garcia L.* RadioAstron reveals a spine/sheath jet structure in 3C273 // *Astronomy & Astrophysics.* 2021. V. 654. A27.
4. *Beskin V., Chernoglazov A., Kiselev A., Nokhrina E.* On the internal structure of relativistic jets collimated by ambient gas pressure // *MNRAS.* 2017. V. 472. P. 3971–3978.
5. *George B. Rybicki, Alan P. Lightman.* Radiative Processes in Astrophysics. Wiley-VCH, 1986. 400 с.
6. *Lyubarsky Y.* Asymptotic Structure of Poynting-Dominated Jets // *The Astrophysical Journal.* 2009. V. 698. P. 1570–1589.
7. *Komissarov S.S., Vlahakis N., Königl A., Barkov M.V.* Magnetic acceleration of ultrarelativistic jets in gamma-ray burst sources // *MNRAS.* 2009. V. 394. P. 1182–1212.

УДК 537.84

Топологические свойства спектрального тензора несжимаемого турбулентного сдвигового течения

С.И. Сафонов¹, А.С. Петросян^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт космических исследований РАН

Исследованы спектральные и топологические характеристики турбулентного течения космической плазмы в приближении магнитной гидродинамики с помощью метода быстрых искажений.

Теория быстрых искажений является методом линейного анализа для вычисления турбулентных течений, изменяющихся под действием разнообразных искажений, таких как крупномасштабный градиент скорости течения, магнитное поле, эффекты граничных поверхностей и массовых сил. Теория быстрых искажений обобщена для однородных турбулентных течений несжимаемой космической плазмы в приближении магнитной гидродинамики и сформулированы условия ее применения. Основное предположение метода состоит в том, что турбулентное поле скорости и магнитное поле реагируют на некоторый внешний эффект настолько быстро, что нелинейные эффекты оказывают пренебрежимо малое влияние на статистические характеристики течения. Получены трехмерные динамические уравнения для флуктуаций скорости и магнитного поля для однородного турбулентного магнитогидродинамического течения в линейном приближении быстрых искажений:

$$\begin{cases} \frac{du'_i}{dt} = -\left(\delta_{ij} - \frac{2k_i k_j}{k^2}\right) S_{nl} u'_i + ik_l B_l b'_i - \nu k^2 u'_i, \\ \frac{db'_i}{dt} = S_{il} b'_i + ik_l B_l u'_i - \eta k^2 b'_i. \end{cases}$$

Найдены аналитические решения для флуктуаций скорости и магнитного поля в приближении квазиизотропной двумерно-трехкомпонентной турбулентности для линейного сдвига внешнего среднего течения.

$$\begin{aligned} u_i(\beta) &= u_{i0} \cos(\gamma\beta \sin \varphi) + ib_{i0} \sin(\gamma\beta \sin \varphi) - \delta_{i1} \frac{1}{\gamma \sin \varphi} u_{20} \sin(\gamma\beta \sin \varphi), \\ b_i(\beta) &= b_{i0} \cos(\gamma\beta \sin \varphi) + iu_{i0} \sin(\gamma\beta \sin \varphi) + \delta_{i1} \frac{1}{\gamma \sin \varphi} b_{20} \sin(\gamma\beta \sin \varphi). \end{aligned}$$

Получены аналитические выражения для эволюции спектров кинетической и магнитной энергии для произвольной двумерно-трехкомпонентной начальной топологии турбулентности. Исследованы развитие изначально изотропной однородной магнитогидродинамической турбулентности при наличии крупномасштабного сдвига скорости и внешнего магнитного поля и переход к анизотропии. Уравнения для спектральных тензоров напряжений Рейнольдса:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} - A_{ln} k_l \frac{\partial}{\partial k_n}\right) R_{ij} + M_{in} R_{nj} + M_{jn} R_{in} - ik_l B_l (C_{ij} - C_{ji}^*) &= 0, \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} - A_{ln} k_l \frac{\partial}{\partial k_n}\right) R_{ij}^M - A_{in} R_{nj}^M - A_{jn} R_{in}^M + ik_l B_l (C_{ij} - C_{ji}^*) &= 0, \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} - A_{ln} k_l \frac{\partial}{\partial k_n}\right) C_{ij} + M_{in} C_{nj} - A_{jn} C_{in} + ik_l B_l (R_{ij}^M - R_{ji}^M) &= 0, \end{aligned}$$

где $M_{in} = (\delta_{ij} - 2\alpha_i \alpha_j) A_{jn} + (\delta_{ij} - \alpha_i \alpha_j) \varepsilon_{jln} \Omega_l$, $\alpha_i = \frac{k_i}{k}$, A_{ij} – градиент средней скорости.

Получен общий вид разложения спектрального тензора корреляций скорости, магнитного поля и перекрестных корреляций на изотропную и анизотропную составляющие, явно выделяя анизотропию по направлению волнового вектора и поляризацию.

$$R_{ij}(k, t) = E(k, t) (\delta_{ij} - \alpha_i \alpha_j) + iH(k, t) \varepsilon_{ijn} \alpha_n + \text{Re} [Z(k, t) N_i N_j]$$

Здесь $E(k, t)$ – кинетическая энергия, $H(k, t)$ – гидродинамическая спиральность, $Z(k, t)$ – поляризация турбулентности. Общая структура спектрального тензора корреляций задается из геометрических соображений в базисе Крайя-Херринга, используя симметрию и несжимаемость жидкости. Полученное выражение можно разложить на базисные матрицы, соответствующие различным симметриям, и определить слагаемые, отвечающие за изотропию, анизотропию по направлению волнового вектора, поляризационную анизотропию и антисимметрию. Показано, что для каждого спектрального тензора есть три скалярных комплекснозначных параметра, которые полностью определяют статистику турбулентности до моментов второго порядка – энергия, поляризация и спиральность. Выделены энергетические и топологические параметры в спектральных тензорах перекрестных корреляций, корреляций скорости и магнитного поля и приведен их физический смысл. Получена замкнутая система уравнений для энергии, спиральности и поляризации турбулентных флуктуаций скорости течения и магнитного поля. Практическую сложность работы с полученными разложениями представляет нетривиальная зависимость от волнового вектора. В приближении слабой анизотропии возможно описать полученную

структуру спектральных тензоров через сферически усредненные спектры энергии, поляризации и спиральности, в то же время сохраняя часть информации об анизотропной структуре спектральных тензоров. Получены общие модельные выражения для спектральных тензоров перекрестных корреляций, корреляций скорости и магнитного поля в приближении слабой анизотропии для поляризации и анизотропии:

$$R_{ij}^{dir}(k) = \frac{15}{2} \frac{E(k)}{4\pi k^2} H_{mn}^{dir}(k) P_{mn}(\alpha) P_{ij}(\alpha),$$

$$R_{ij}^{pol}(k) = \frac{5}{2} \frac{E(k)}{4\pi k^2} H_{mn}^{pol}(k) \left(P_{mi}(\alpha) P_{nj}(\alpha) - \frac{1}{2} P_{mn}(\alpha) P_{ij}(\alpha) \right).$$

Получены модельные уравнения для гидродинамической, перекрестной и токовой спиральностей.

Работа поддержана грантом РФФИ № 19-02-00016.

Литература

1. *Sagaut P., Cambon C.* Homogeneous Turbulence Dynamics, Second Edition, Springer, 2018.
2. *Oughton S., Rädler K.H., Matthaeus W.H.* General second-rank correlation tensors for homogeneous magnetohydrodynamic turbulence // Phys. Rev. E 1997. V. 56. P. 2875–2888.

УДК 533.9.01

Резонансное взаимодействие волн магнито-Пуанкаре в астрофизической плазме в приближении мелкой воды

Д.А. Климачков², А.С. Петросян^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский институт)

²Институт космических исследований РАН

Большинство наблюдаемых объектов во Вселенной находится в состоянии плазмы и подвержены вращению. Поведение различных звёзд и планет описывается магнитной гидродинамикой тонких слоев плазмы со свободной границей в поле силы тяжести. Например, течения солнечного тахоклина (тонкого слоя внутри Солнца, находящегося над конвективной зоной), динамика атмосфер нейтронных звезд, течения аккреционных дисков нейтронных звезд, захваченные приливами экзопланеты с магнитоактивными атмосферами. Полная трехмерная система магнитогидродинамических уравнений вращающейся плазмы достаточно сложна как для аналитического исследования, так и для численного моделирования. Поэтому для описания таких течений астрофизической плазмы используется магнитогидродинамическое приближение мелкой воды.

Уравнения магнитной гидродинамики вращающейся плазмы в приближении мелкой воды являются альтернативой магнитогидродинамическим уравнениям тяжелой жидкости со свободной границей в случае, когда исследуется слой малой толщины по отношению к характерному горизонтальному линейному размеру задачи, и вертикальными ускорениями в слое можно пренебречь. В работе магнитогидродинамические уравнения в приближении мелкой воды записаны путем введения эффектов внешнего поля в уравнения для горизонтальных скоростей и для горизонтальных магнитных полей. Полученная система играет такую же важную роль в космической и астрофизической плазме, как и классические уравнения мелкой воды в гидродинамике нейтральной жидкости. Заметим, что существенным отличием магнитогидродинамических уравнений вращающейся плазмы по сравнению с нейтральной жидкостью является присутствие условия бездивергентности магнитного поля, выполняющегося тождественно при задании корректных начальных условий.

В линейном приближении система магнитогидродинамических уравнений мелкой воды во внешнем вертикальном магнитном поле имеет решения, описывающие волны магнито-Пуанкаре и магнитострофические волны. Наличие внешнего вертикального магнитного поля характерно для магнитогидродинамических течений в нейтронных звездах и в магнитоактивных атмосферах экзопланет, захваченных приливами несущей звезды. Закон дисперсии волн магнито-Пуанкаре и магнитострофических волн в вертикальном магнитном поле в случае слабонелинейных волн конечной амплитуды включают трехволновые взаимодействия волн Пуанкаре, поскольку в этом случае не выполняются условия синхронизма для таких волн. Показано, что тем не менее, дисперсионные соотношения для

волн Пуанкаре и магнитоострофических волн допускают наличие четырехволновых резонансных взаимодействий.

В работе развита нелинейная теория четырехволновых взаимодействий волн магнито-Пуанкаре и магнитоострофических волн методом многомасштабных разложений. Получены уравнения на амплитуды взаимодействующих волн. Найдены соотношения для энергий взаимодействующих волн и исследованы некоторые начальные состояния нелинейной системы, приводящие к усилению одних волн в поле других волн, участвующих во взаимодействии.

Работа поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «Базис» и грантом РФФИ № 19-02-00016.

УДК 551.510.535

Проектирование и разработка фреймворка валидации моделей *D*-области ионосферы Земли

Д.А. Сакаев, Е.М. Швец

Мурманский государственный технический университет

В настоящей работе обсуждается программное средство для обеспечения возможности проверки адекватности (валидации) различных моделей *D*-области ионосферы Земли. Осуществление валидации предполагается путем сравнения с наборами данных наблюдений, а также со статистическими (эмпирическими) моделями, которые фактически являются способом компактного представления больших наборов данных. Важность валидации отражена в ГОСТ Р 57700.21. Например, ГОСТ Р 57700.24 устанавливает требования к содержанию и наполнению валидационного базиса, предназначенного для проведения процедур валидации компьютерных моделей и программного обеспечения компьютерного моделирования. Проблема валидации моделей и воспроизводимости получаемых с их помощью результатов нашла свое отражение не только в нормативных актах, но и в ряде работ, посвященных проблеме воспроизводимости результатов научных исследований (например, работы [1, 2]). К сожалению, множество результатов в настоящее время оказываются невозможными.

Ученые и научные работники в первую очередь осуществляют научную деятельность, и не являются профессиональными программистами. По этой причине для решения своих задач используют различные среды интерактивного выполнения расчетов, например: Interactive Data Language (IDL), Matrix Laboratory (MATLAB), Mathematica, а также некоторые другие, использование которых в большей степени связано с традициями того или иного исследовательского коллектива. При проектировании собственного решения и выборе целевой среды интерактивной разработки мы ориентировались на бесплатность, доступность, распространенность и наличие широкого сообщества. На данный момент этим критериям соответствует среда интерактивных вычислений Jupyter Notebook, вокруг которой строится сообщество научных вычислений, включая широкий набор библиотек, в том числе NumPy, SciPy, а также ряд специализированных библиотек для различных областей геофизики. Для обеспечения возможности использования разрабатываемого фреймворка в экосистеме Jupyter Notebook, было принято решение реализовать его в виде набора Python-пакетов, обеспечивающих доступ к статистическим моделям *D*-области и данным наблюдений.

Поскольку ионосфера «разделяется» на множество областей, в данной работе авторы ограничились *D*-областью. *D*-область, несмотря на длительный период исследований, все еще недостаточно изучена. Это связано с тем, что *D*-область (50–90 км) находится слишком низко для спутников (в том числе низкоорбитальных) и слишком высоко для традиционных баллонных наблюдений. Одной из особенностей *D*-области ионосферы является сложность физико-химических процессов в спокойных условиях. При этом идентификация относительной роли процессов нейтральной атмосферы (как определяющих ее фоновый газовый состав, так и динамических характеристик) остается до конца не исследованной.

Как было отмечено ранее, для *D*-области существует проблема получения экспериментальных данных. Многие научные работы ссылаются на данные, которые сложно найти в свободном доступе, – это данные в основном из 70-х годов. Зачастую эти данные доступны в виде таблиц в журналах 60–70-х годов или в виде графиков высотных профилей относительной ионной концентрации, что подразумевает оцифровку этих данных. На данный момент в части данных разработана структура хранения, формат хранения и библиотека для манипулирования с данными в оперативной памяти. В части моделей в состав фреймворка включена модель невозмущенной неавральной *D*-области ионосферы

FIRI 2018 [3]. Предыдущая версия модели FIRI 2018, а именно FT-2001 [4] включена в международную справочную модель ионосферы International Reference Ionosphere (IRI) [5], которая является стандартом в научном сообществе для воспроизведения параметров ионосферы. В разрабатываемой фреймворк дополнительно включена модель Данилова [6], которая имеет параметризацию термосферных эффектов. Модель Данилова входит в состав международной справочной онлайн версии IRI 2016, но при этом в онлайн версии IRI модель Данилова недоступна необходимо использовать тестовую программу, находящуюся в одном из исходных файлов модели IRI 2016, с наименованием iritest.for, имеющую специальную опцию вывода для печати значений расчета с помощью модели Данилова. Ввиду этого было решено (ориентируясь на работу [6]) и исходный FORTRAN-код, осуществить портирование модели на Python и добавления модели Данилова в состав фреймворка. В дальнейшем, в качестве расширения области валидации моделей, планируется добавить модель авроральной зоны IMAZ.

Литература

1. Дымников В.П., Лыкосов В.Н., Володин Е.М. Проблемы моделирования климата и его изменений // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2006. Т. 42, № 5. С. 618–636.
2. Суворов А.А. [и др.]. Проблема верификации средств моделирования электроэнергетических систем и концепция ее решения // Вестник Ивановского государственного энергетического университета. 2017. № 1.
3. Friedrich M., Pock C., & Torkar K. FIRI-2018, an updated empirical model of the lower ionosphere. Journal of Geophysical Research: Space Physics, 123, 6737–6751. <https://doi.org/10.1029/2018JA025437>.
4. Friedrich M., Torkar K.M. FIRI: A semiempirical model of the lower ionosphere // Journal of Geophysical Research: Space Physics. 2001. V. 106, N A10. P. 21409–21418. <https://doi.org/10.1029/2001JA900070>.
5. International Reference Ionosphere. [Электронный ресурс]. URL: <http://irimodel.org/>
6. Danilov A., Rodevich A., and Smirnova N. Problems with incorporating a new D-region model into the IRI, Adv. Space Res., 15, 165–169, 1995. DOI: 10.1016/S0273-1177(99)80042-8.

УДК 524.882

Тени черных дыр и кротовых нор: сходства и отличия

М.А. Бугаев¹, И.Д. Новиков^{2,3,4}, С.В. Репин^{5,2}, А.А. Шелковникова⁵

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Астрокосмический центр

³The Niels Bohr International Academy, The Niels Bohr Institute

⁴Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

⁵Физико-математическая школа № 2007

Построена тень кротовой норы Морриса–Торна на фоне плоского ламбертовского экрана, расположенного за кротовой норой и найдено распределение интенсивности излучения вблизи границ тени. Выполнено сравнение этой тени с тенью черной дыры Шварцшильда [1]. Оба объекта являются центрально-симметричными, но структура пространства-времени вблизи них разная.

Метрика Морриса–Торна [2, 3]	Метрика Шварцшильда
$\frac{dt}{d\sigma} = \frac{1}{r^2}, \quad (1)$	$\frac{dt}{d\sigma} = \frac{1}{r^2(1-2r)}, \quad (7)$
$\frac{dr}{d\sigma} = r_1, \quad (2)$	$\frac{dr}{d\sigma} = r_1, \quad (8)$
$\frac{dr_1}{d\sigma} = 2(\eta + \xi^2)r^3 - (1 + \eta + \xi^2)r, \quad (3)$	$\frac{dr_1}{d\sigma} = 3(\eta + \xi^2)r^2 - (\eta + \xi^2)r, \quad (9)$
$\frac{d\theta}{d\sigma} = \theta_1, \quad (4)$	$\frac{d\theta}{d\sigma} = \theta_1, \quad (10)$
$\frac{d\theta_1}{d\sigma} = \frac{\xi^2 \cos \theta}{\sin^3 \theta}, \quad (5)$	$\frac{d\theta_1}{d\sigma} = \frac{\xi^2 \cos \theta}{\sin^3 \theta}, \quad (11)$
$\frac{d\varphi}{d\sigma} = \frac{\xi}{\sin^2 \theta}, \quad (6)$	$\frac{d\varphi}{d\sigma} = \frac{\xi}{\sin^2 \theta}, \quad (12)$

Для построения теней необходимо численным интегрированием построить большое количество нулевых геодезических в поле этих объектов. Уравнения движения кванта получаются из уравнения Гамильтона–Якоби после разделения переменных и имеют вид где $t, 1/r, \theta, \varphi$ – координаты Бойера–Линдквиста, ξ и η – константы Чандрасекара, r_1 и θ_1 – вспомогательные переменные, которые нужны для упрощения численного интегрирования [4].

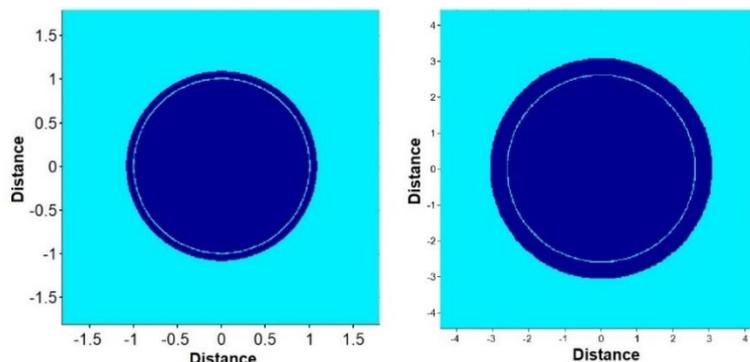


Рис. 1. Тени кротовой норы Морриса–Торна (слева) и черной дыры Шварцшильда (справа) на фоне удаленного ламбертовского экрана

На рис. 1 показана тень кротовой норы Морриса–Торна (слева) и для сравнения приведена тень черной дыры Шварцшильда (справа). Внутри силуэта тени в обоих случаях видно по-разному расположенное фотонное кольцо, которое образовано квантами, сделавшими несколько оборотов вокруг центрального объекта. Этот эффект отсутствует в классической механике.

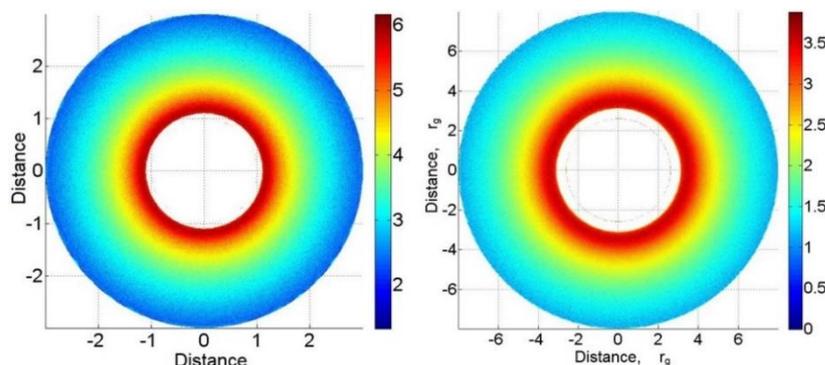


Рис. 2. Распределение интенсивности излучения вблизи границы тени кротовой норы Морриса–Торна (слева) и черной дыры Шварцшильда (справа)

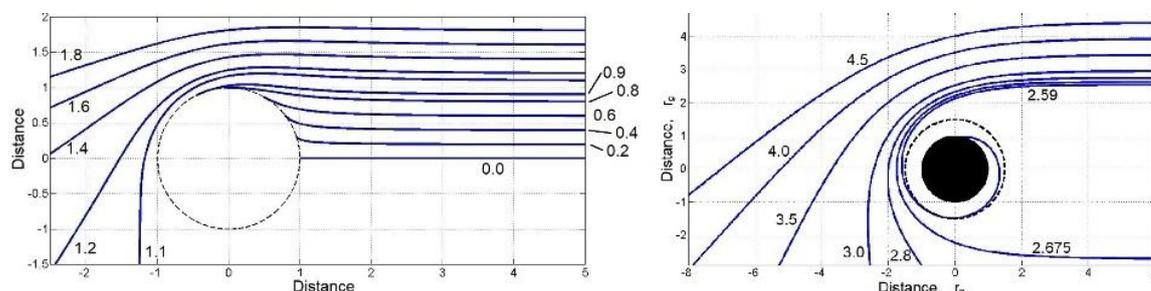


Рис. 3. Траектории квантов в поле кротовой норы Морриса–Торна (слева) и черной дыры Шварцшильда (справа). У каждой траектории указано значение прицельного параметра

На рис. 2 в условных цветах показано распределение интенсивности излучения вблизи границ тени кротовой норы Морриса–Торна (слева) и черной дыры Шварцшильда (справа). Из рисунка видно, что для кротовой норы при приближении к границе тени излучение нарастает сильнее, чем для черной дыры. Структура этой «короны» или «ауры» может служить индикатором, позволяющим отличить эти объекты друг от друга в астрономических наблюдениях. Причина различия понятна из рис. 3, где показаны траектории квантов и поле кротовой норы (слева) и черной дыры (справа). Из рисунка следует,

что черная дыра сильнее отклоняет кванты при том же значении прицельного параметра. Это в свою очередь ведет к тому, что при приближении к границе тени черной дыры интенсивность излучения будет нарастать слабее.

Высказывались предположения, что в центрах некоторых галактик могут находиться не черные дыры, а кротовые норы [5]. Рассмотренная модель позволяет указать различия в наблюдательных проявлениях черных дыр и кротовых нор. Это положение фотонного кольца и распределение интенсивности излучения вблизи границ тени.

Литература

1. Бугаев М.А., Новиков И.Д., Репин С.В., Шелковникова А.А. Гравитационное линзирование и тени кротовой норы // *Астрономический журнал*, 2021. Т. 98, № 12. Р. 1–9.
2. Morris M.S., Thorne K.S. Wormholes in spacetime and their use for interstellar travel: A tool for teaching general relativity // *American Journal of Physics*, 1988. V. 56. P. 395.
3. Morris M.S., Thorne K.S., Yurtsever U. Wormholes, time machines, and the weak energy condition // *Phys. Rev. Lett.*, 1988. V. 61. P. 1446.
4. Zakharov A.F., Repin S.V. The spectrum of an accretion disk around a rotation black hole // *Astronomy Reports*, 1999. V. 43. P. 705.
5. Kardashev N.S., Novikov I.D., Repin S.V. Wormholes with entrances close to each other // *Physics – Uspekhi*, V. 63. N 6. P. 617.

УДК 524.7-52

Магнитные поля радиопульсаров

Д.С.Загорюля¹, А.Ю.Истомин¹, В.С.Бескин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

В работе изучалась функция рождения радиопульсаров по величине магнитного поля $Q(B)$ в диапазоне периодов $0.03 \text{ с} < P < 0.5 \text{ с}$. Из анализа наблюдаемых распределений по периоду P и производной периода \dot{P} было показано, что эта функция распределения имеет степенной вид. На основе полученных результатов была сделана оценка числа магнетаров (нейтронных звезд со сверхсильными магнитными полями 1014–1015 Гс) для двух основных моделей эволюции нейтронных звезд.

В силу того, что для большинства пульсаров с достаточной точностью возможно измерить только их период P и производную периода \dot{P} , многие вопросы все еще остаются без ответа. Например, до сих пор неизвестно направление эволюции угла χ между осью вращения пульсара и его магнитной осью. Поэтому в настоящее время сосуществуют две теоретические модели, предсказывающие различное направление эволюции (в сторону малых или больших, порядка 90°) угла наклона χ [1]. В связи с этим, статистический анализ становится основным инструментом, позволяющим сделать выбор между двумя теориями эволюции. Однако этот метод сопряжен с большим количеством неопределенностей, так как при таком моделировании необходимо вводить свободные функции рождения пульсаров (а также ряд других свободных параметров).

В нашей работе анализ функции рождения по магнитному полю проводился для пульсаров с периодами от 0.03 с до 0.5 с. Этот диапазон был выбран по нескольким причинам. Прежде всего, нижняя граница отсекает миллисекундные пульсары, эволюция которых протекает не так, как у обычных пульсаров. Верхняя же определяет диапазон, в котором наблюдаемое распределение пульсаров по периоду P подчиняется степенной зависимости. Также этот диапазон важен тем, что в нем можно не учитывать зависящую от угла наклона χ линию смерти. Все эти факторы позволяют исследовать вопрос о функции рождения радиопульсаров на основе кинетического уравнения на функцию распределения $N(P, \chi, B)$, которое решается аналитически в квадратурах в предположении о факторизуемости функции рождения $Q(P, \chi, B) = Q(P)Q(\chi)Q(B)$, отсутствия эволюции магнитного поля (что разумно для молодых пульсаров), а также благодаря наличию интегралов движения $I(P, \chi) = \text{const}$.

Таким образом, в работе анализировались явные решения для двух моделей эволюции пульсаров. Благодаря тому, что в рассматриваемом диапазоне периодов линия смерти практически не ограничивает область допустимых углов χ , можно получить распределение по магнитному полю, интегрируя функцию распределения $N(P, \chi, B)$ в постоянных пределах. Проведя эти вычисления, можно получить связь между распределением по магнитному полю и функцией рождения для каждой модели.

В свою очередь, распределение пульсаров по магнитному полю определяет наблюдаемое распределение пульсаров по производной периода \dot{P} . Поэтому используя наблюдаемое распределение по производной периода, можно восстановить и функцию рождения по магнитному полю $Q(B)$.

Наблюдаемое распределение пульсаров по производной периода \dot{P} в исследуемом нами диапазоне $0.03 \text{ с} < P < 0.5 \text{ с}$ показано на рис. 1. Как мы видим, оно достаточно хорошо аппроксимируется двумя степенными функциями с изломом в районе $\dot{P} \sim 0.8 \cdot 10^{-13}$. Используя эту наблюдаемую зависимость, а (с учетом функций видимости) получить выражение для распределения рождающихся пульсаров по магнитному полю B . В результате, было показано, что для обеих моделей эволюции при магнитных полях $B > 10^{12} \text{ Гс}$ функция рождения по магнитному полю $Q(B)$ также может быть приближена двумя степенными асимптотиками. При этом в модели MHD (угол χ стремится к 0°) излом имеет место при магнитных полях $B \approx 5 \cdot 10^{12} \text{ Гс}$, тогда как в модели BGI (угол χ стремится к 90°) излом соответствует магнитному полю $B \approx 2.5 \cdot 10^{13} \text{ Гс}$.

Зная теперь функцию рождения радиопульсаров по величине их магнитного поля $Q(B)$, естественно попробовать оценить количество наблюдаемых магнетаров, т.е. нейтронных звезд со сверхсильными магнитными полями $B \sim 10^{14} - 10^{15} \text{ Гс}$. Отметим правда, что, как видно из рис. 1, наш анализ может дать уверенные результаты лишь для пульсаров, имеющих производную периода $\dot{P} < 10^{-12}$, что соответствует магнитным полям $B < 0.2 \cdot 10^{14} \text{ Гс}$ для модели MHD и $B < 10^{14} \text{ Гс}$ для модели BGI. В итоге, такая оценка сверху для относительного числа рождаемых магнетаров приводит к значениям 1–4% для модели MHD, тогда как в модели BGI мы имеем уже 20–40%, что, по-видимому, лучше соответствует наблюдениям. Подчеркнем, что если бы для экстраполяции распределения по производной периода использовалось стандартное лог-нормальное распределение, то число пульсаров с магнетарными магнитными полями было бы экспоненциально мало.

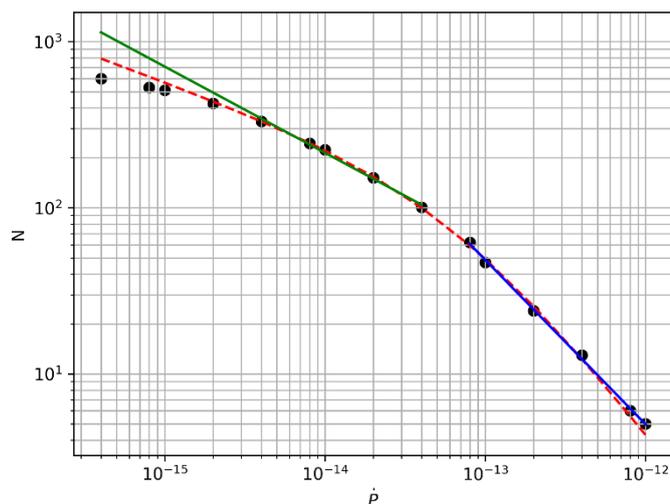


Рис. 1. Наблюдаемое интегральное распределение пульсаров по производной периода для $0.03 \text{ с} < P < 0.5 \text{ с}$

Также было проведено Монте-Карло моделирование эволюции пульсаров, которое показало, что результаты для обеих моделей хорошо согласуются с наблюдаемыми распределениями пульсаров по величинам P и \dot{P} . Это позволило сделать оценку количества интеримпульсных пульсаров, как соосных, так и ортогональных, которые подтвердили анализ, проведенный в работе [3]: наблюдаемое число интеримпульсных пульсаров согласуются с предсказаниями модели BGI, но не согласуются с моделью MHD. При этом сами предсказания, полученные для уточненной функции рождения $Q(B)$, слабо отличаются от результатов, представленных в работе [3], что показывает слабую зависимость оценки числа интеримпульсных пульсаров от функции рождения по магнитному полю.

Работа была поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 20-02-00469).

Литература

1. *Arzamasskiy L.I., Beskin V. S., Pirov K.K.* Statistics of interpulse radio pulsars: the key to solving the alignment/counter-alignment problem // MNRAS 2017. V. 466. P. 2325.
2. *Бескин В.С.* Радиопульсары – уже 50 лет! // УФН 2018. Т. 188. С. 377.
3. *Novoselov E.M., Beskin V. S., Galishnikova A.K., Rashkovetskiy M.M., Biryukov A.V.* Orthogonal pulsars as a key test for pulsar evolution // MNRAS 2020. V. 494. P. 3899.

Study the trajectory of dust particles by simulating the plasma environment on the Moon's surface

M. E. Abdelaal¹, I. A. Shashkova², A. Y. Poroykov³, I. A. Kuznetsov², G. G. Dolnikov², A. A. Kartasheva², A. Shekhovtsova², A. S. Bychkova², A. N. Lyash², A. E. Dubov² and A. V. Zakharov²

¹Moscow Institute of Physics and Technology

²Space Research Institute of the Russian Academy of Sciences

³Moscow Power Engineering Institute

The Moon is one of our solar system's most significant airless bodies since it reflects the Earth's closest natural plasma climate. The lunar surface is still dense with interactions between plasma and regolith due to the effects of micrometeorites, solar radiation, and solar wind [1] [3]. According to these activities, a near-surface double layer is created from the photoelectrons and the charged regolith surface [4].

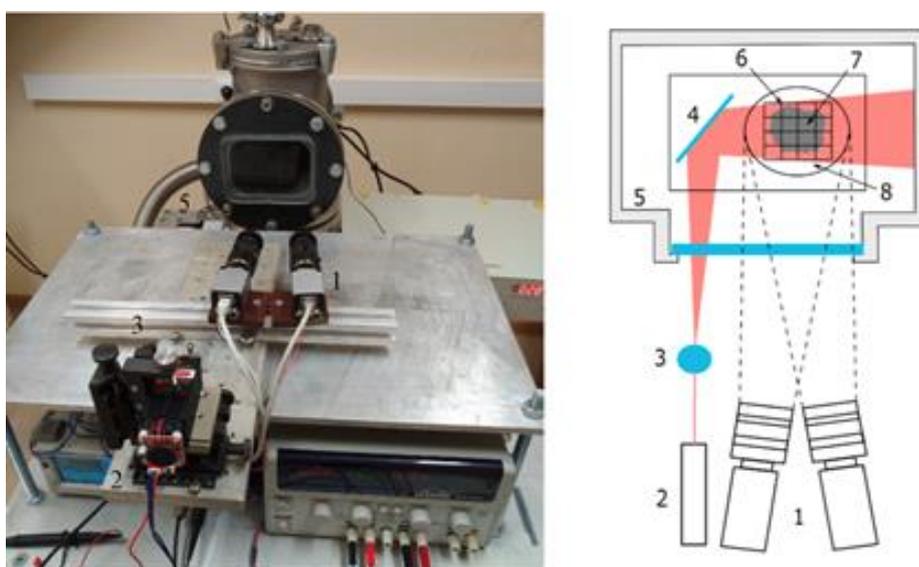


Fig. 1. Picture and scheme (top view) of the experimental setup for investigating the dust particles trajectories (1 – CMOS cameras, 2 – laser, 3 – beam expander, 4 – mirror, 5 – vacuum chamber, 6 – steel mesh, 7 – dust particles, 8 – conductive substrate)

This study demonstrates the 3D dynamic trajectories of charged micro-particles under the influence of an external electric field and a plasma source, which will aid in demonstrating the plasma-dust process on the lunar surface. The experimental setup for the physical modeling of dusty plasma levitation using a vacuum chamber is defined. A stereo system of two cameras with a laser as a source of illumination is used to visualize the dust particle trajectory. Image processing techniques and examples of processing results are provided for estimating the particle trajectory in three-dimensional coordinates.

Using different materials with different size particles, the experiment was conducted. The experimental parameters are listed in Table 1. In the first experiment, Silicon dioxide (SiO₂) spheres with smooth surfaces and diameters of 90–100 μm were used. We choose this size because the spheres of comparable sizes were found in the lunar regolith [2]. Besides silicon dioxide, particles from Andesite, sand, and Mica were sieved with an analytical sieve shaker (Retsch AS200) to obtain 90–100 μm samples.

The proposed approach and image processing technique allow not only visualizing and obtaining the quantitative values of dust particles levitation parameters. These parameters make a valuable contribution to physical experiments on modeling the dusty plasma levitation and increase the likelihood of success of future lunar landing missions.

The ability to measure particle velocities and charges was facilitated by the ability to determine 3D trajectories of levitated particles. These parameters will be useful in future experiments involving the modeling of dust

plasma levitation. Our method will be used to analyze data collected during future lunar missions, such as the Luna-Glob (2022) and Luna-Resource (2025).

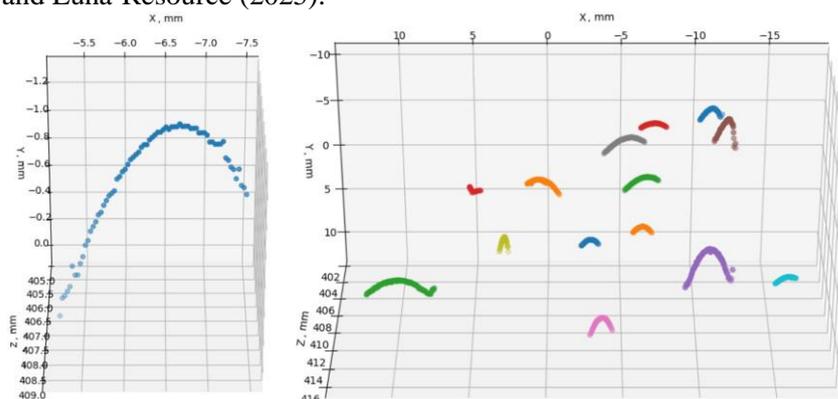


Fig. 2. Particle trajectory obtained after the image processing

References

1. *Zakharov, A.V., Zelenyi, L.M. and Popel, S.I.*, Lunar Dust: Properties and Potential Hazards // *Solar System Research*, 2020 V. 54(6), P. 455–476.
2. *Heiken, Grant H., David T. Vaniman, and Bevan M. French* Lunar Sourcebook, a user's guide to the Moon. 1991.
3. *Levine, J. S.* Lunar Dust and Its Impact on Human Exploration: Identifying the Problems // *The Impact of Lunar Dust on Human Exploration* 2141 (2020): 5007.
4. *Stubbs, Timothy J., Richard R. Vondrak, and William M. Farrell* Impact of dust on lunar exploration. URL: <http://hefd.jsc.nasa.gov/files/StubbsImpactOnExploration4075> (2007).

УДК 537.84

Численное моделирование транспорта частиц в дисковых моделях

Е.А. Семенюк¹, А.С. Петросян^{1,2}

¹Институт космических исследований РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Планеты формируются в протопланетных дисках путем парных столкновений частиц межзвездной пыли. Характер данных столкновений во многом определяется параметрами твердых частиц и их взаимодействием с турбулентным газовым течением в диске. В данной работе исследуется динамика межзвездной пыли в турбулентном потоке газа. Для достижения поставленной цели проведено численное моделирование движения пыли в ограниченной области протопланетного диска. Пренебрежение влиянием частиц на динамику газового потока позволяет разделить решение поставленной задачи на два этапа: на первом этапе осуществлено локальное моделирование турбулентного течения газа, на втором – моделирование движения частиц в потоке газа. Динамика сжимаемого газового течения рассматривается в трехмерном случае описывается уравнением Навье–Стокса, уравнением непрерывности и уравнением состояния (1):

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla P - \nabla \Phi + \nu \Delta \mathbf{u}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \cdot \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$P = P(\rho)$$

Здесь \mathbf{u} – скорость газа, P – давление газа, Φ – гравитационный потенциал протозвезды, ν – кинематическая вязкость газа.

Глобальная постановка задачи не позволяет исследовать парные столкновения частиц, поскольку они носят локальный характер. В связи с этим осуществлён переход к локальной области протопланетного диска. Данный переход осуществлён в 3 этапа, изображенных на рис. 1.

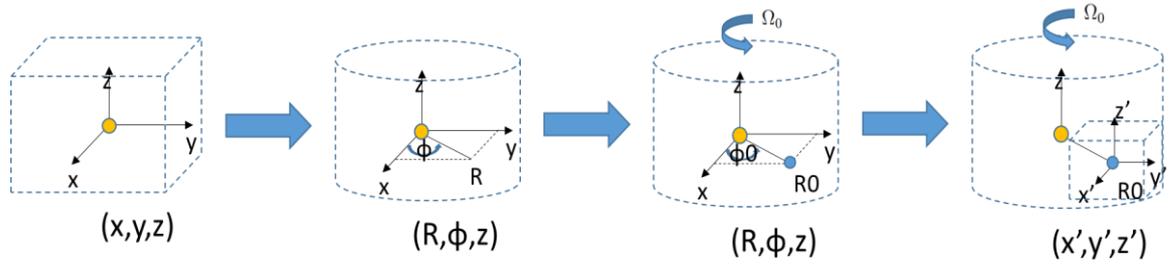


Рис. 1. Переход к локальному представлению. Глобальная декартова СК (x, y, z) переходит в глобальную цилиндрическую СК (R, ϕ, z) . Затем осуществляется переход в глобальную сопутствующую СК (скорость вращения системы связана со скоростью вращения точки с координатами $(R_0, \phi_0, 0)$ за счет гравитации). Локализация возле точки $(R_0, \phi_0, 0)$ в декартовой СК (x', y', z') завершает переход в вычислительную область протопланетного диска

Локальное приближение заключается в том, что получающиеся уравнения для возмущений на устойчивом основном потоке совпадают с исходными глобальными уравнениями в небольшой области вокруг фиксированной точки в диске. К преимуществам данной модели относятся удобная постановка граничных условий (периодичные в физическом пространстве), точность вычислений (результаты SB хорошо согласуются с более точными методами вычислений турбулентности RANS, LES, DNS). Обезразмеривание локальных уравнений осуществлено с помощью двух малых безразмерных параметров, связанных с характерным размером вычислительной области, эффективного давления и плотности.

Стационарное решение локальной безразмерной системы уравнений представлено на рис. 2.

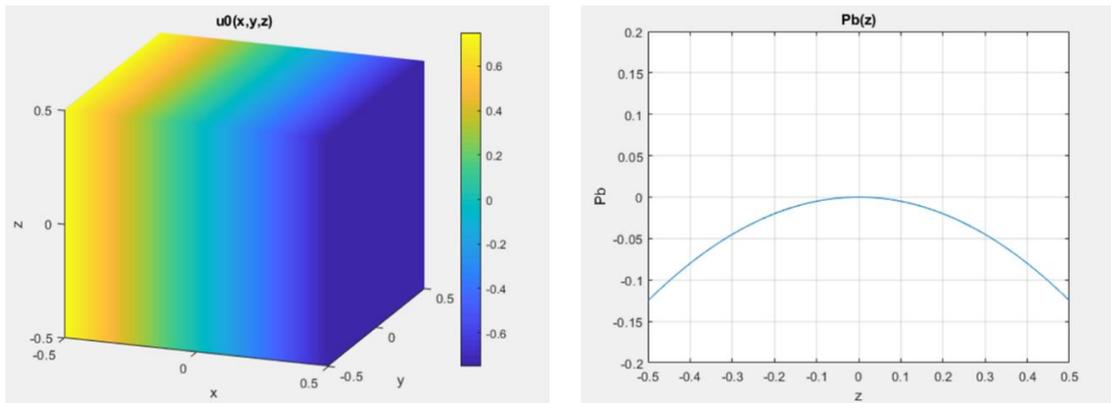


Рис. 2. Стационарное поле скоростей газа (слева), стационарное давление газа (справа)

Скорость и давление газа представлены в виде сумм стационарных величин и возмущений. Для протопланетного диска зафиксирована удалённая ячейка, высота которой гораздо меньше толщины протопланетного диска. В этом случае безразмерная система уравнений для возмущений при отсутствии флуктуаций плотности в начальный момент времени является несжимаемой, что сильно упрощает процесс вычислений и приводит к уравнениям модели Small Shearing Box. Результирующая система уравнений для возмущений газового потока:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}' = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u'_x}{\partial t} - \frac{3}{2} \Omega_0 x \frac{\partial u'_x}{\partial y} + (\mathbf{u}' \cdot \nabla) u'_x - 2\Omega_0 u'_y &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \Delta u'_x \\ \frac{\partial u'_y}{\partial t} - \frac{3}{2} \Omega_0 x \frac{\partial u'_y}{\partial y} + (\mathbf{u}' \cdot \nabla) u'_y + \frac{1}{2} \Omega_0 u'_x &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \Delta u'_y \\ \frac{\partial u'_z}{\partial t} - \frac{3}{2} \Omega_0 x \frac{\partial u'_z}{\partial y} + (\mathbf{u}' \cdot \nabla) u'_z &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{Re} \Delta u'_z \end{aligned} \quad (2)$$

Начальное условие для возмущений скорости и давления получено с помощью метода синтетической турбулентности, в котором поле скоростей представлено в виде суммы статистически неза-

висимых мод Фурье со случайными коэффициентами, которые подбираются таким образом, что результирующее поле скоростей удовлетворяет уравнению непрерывности, имеет форму заданного для уравнения Эйлера энергетического спектра изотропной трехмерной турбулентности. Данный подход позволяет сгенерировать однородную изотропную турбулентность, оптимальную с точки зрения процесса рандомизации.

Движение пыли в турбулентном газовом потоке в простейшем случае определяется трением между газом и твердыми частицами. Режим трения зависит от размера частиц, в данной задаче рассматриваются только малые частицы $St = 1$. Для отслеживания скоплений пылевых агрегатов движение пыли рассматривается в эйлеровом представлении. В случае малых частиц движение пыли подчиняется движению газа и допустимо разложение в ряд Тейлора:

$$v_i(\mathbf{x}, t); u_i(\mathbf{x}, t) - \tau_p \frac{du_i(\mathbf{x}, t)}{dt} \quad (3)$$

Данное разложение приводит к тому, что дивергенция скорости частиц пыли полностью определяется параметрами пыли и полем скоростей газа. Если рассматривать пыль как сжимаемый газ частиц, то для него справедливо уравнение непрерывности (5):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \cdot \nabla_i \cdot v_i = 0 \quad (5)$$

Здесь ρ – плотность газа частиц.

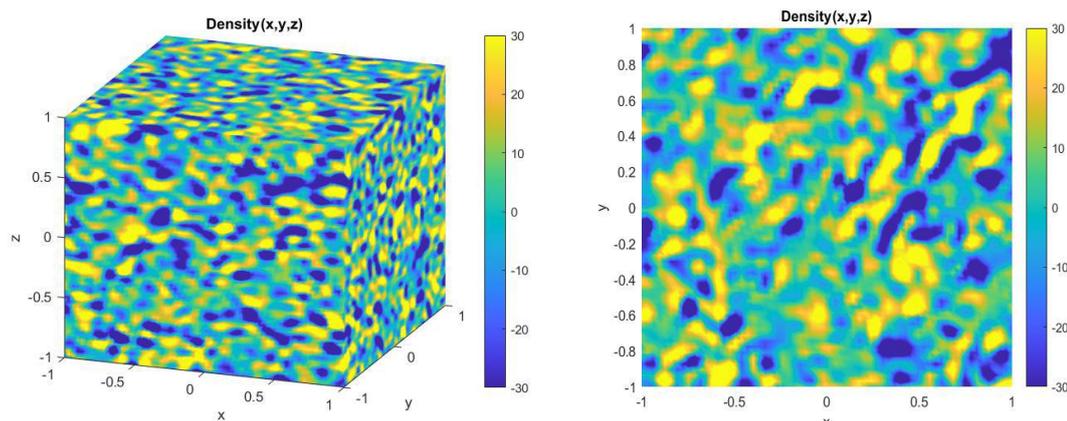


Рис. 3. Изменение плотности межзвездной пыли в кеплеровском течении протопланетного диска (классическая синтетическая турбулентность в качестве начального условия): (а) распределение в трехмерной вычислительной области; (б) более наглядный двумерных график для фиксированной высоты $z = 0$ (глобальный максимум давления стационарного потока)

На результирующем распределении изменения плотности пыли отчетливо наблюдаются устойчивые области сжатия межзвездной пыли, что свидетельствует о кластеризации межзвездной пыли. Таким образом, полученные результаты приближенно описывают механизм роста планетезималей в протопланетных дисках путем парных столкновений частиц пыли в турбулентном течении.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-02-00016.

Литература

1. *Pan L., Padoan P., Scalo J., Kritsuk A.G., Norman M.L.* Turbulent Clustering of Protoplanetary Dust and Planetesimal Formation // *The Astrophysical Journal*, V. 740, N 1.
2. *Hawley J. F., Gammie C.F., Balbus S.A.* Local Three-dimensional Magnetohydrodynamic Simulations of Accretion Disks // *Astrophysical Journal* V. 440, P. 742.

Влияние крупномасштабной сжимаемости на нелинейную динамику волн во вращающихся течениях мелкой воды

М.А. Юденкова¹, Д.А. Климачков², А.С. Петросян^{2,1}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт космических исследований РАН

В работе исследуется влияние сжимаемости и вращения на нелинейную динамику волн в приближении мелкой воды. Приближение мелкой воды обобщается для описания крупномасштабных течений тяжелой жидкости со свободной поверхностью, рассматриваются линейные волны для различных приближений вращения, исследуются слабонелинейные взаимодействия полученных волн.

В работе получена система дифференциальных уравнений движения вращающейся сжимаемой жидкости в поле силы тяжести со свободной границей в приближении мелкой воды. Полученная система уравнений нетривиально зависит от характерного вертикального масштаба течения и масштаба высот, на котором изменение плотности становится существенным. В отличие от классических уравнений мелкой воды для несжимаемых течений, высота свободной поверхности не может считаться аналогом массы столба жидкости и закон сохранения массы записывается для новой переменной $l = h\bar{\rho}$, являющейся произведением высоты свободной поверхности на среднюю плотность жидкости. Высота столба жидкости нелинейно зависит от переменной l (рис. 1). Характерным масштабом сжимаемости является плотностная высота $H_p = c_p T / g$. Если высота столба жидкости много меньше характерной плотностной высоты, то эффекты сжимаемости становятся несущественными, а полученная система уравнений в пределе переходит в классическую систему уравнений мелкой воды.

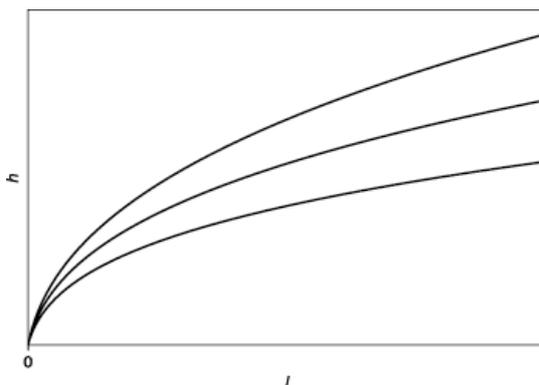


Рис. 1. Зависимость новой переменной l от высоты h при различных коэффициентах адиабаты γ .

$\gamma = 1.4$ – нижняя кривая, $\gamma = 1.5$ – средняя кривая, $\gamma = 1.6$ – верхняя кривая

Рассматриваются два типа вращения – приближение f -плоскости и бета-плоскости. В первом случае параметр Кориолиса считается постоянным $f = f_0 = \text{const}$. В приближении бета-плоскости параметр Кориолиса линейно зависит от широты $f = f_0 + \beta y$. Характерной величиной для исследования вращения является радиус деформации Россби $L = \sqrt{g} / f_0$. В длинноволновом пределе, то есть, когда длина волны много больше радиуса деформации L на f -плоскости возникают инерционные колебания, а на бета-плоскости – волны Россби. В коротковолновом пределе на f - и бета-плоскостях возникают волны Пуанкаре.

Качественный анализ дисперсионных соотношений показал, что на f -плоскости невозможны трехволновые взаимодействия волн Пуанкаре в сжимаемой жидкости, а на бета-плоскости возможны трехволновые взаимодействия для трех волн Россби в сжимаемой жидкости, а также двух волн Россби и одной волны Пуанкаре в сжимаемой жидкости. На бета-плоскости асимптотическим методом многомасштабных разложений получены нелинейные уравнения на амплитуды взаимодействующих волн. Для каждого случая трехволновых взаимодействий исследованы параметрические неустойчивости и найдены коэффициенты взаимодействия трех волн в сжимаемой жидкости на бета-плоскости.

Численное моделирование устойчиво стратифицированной турбулентности в физике планет

О. П. Воробьев¹, А. С. Петросян^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт космических исследований РАН

Рассматривается тонкий сферический слой жидкости в трехмерной системе с вращением. Трехмерная система описывается с помощью уравнений Буссинеска для вращающейся стратифицированной жидкости. Система уравнений Буссинеска во вращающейся системе отсчета может быть представлена в виде (1–3):

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{\nabla P}{\rho_0} - \alpha T \mathbf{g} + 2\mathbf{v} \times \boldsymbol{\Omega} + \nu \nabla^2 \mathbf{v} \quad (2)$$

$$\frac{dT}{dt} + \beta v_r = \kappa \nabla^2 T \quad (3)$$

где $d/dt \equiv \partial/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla$. Приняты следующие обозначения: \mathbf{v} – это скорость жидкости, ρ_0 – средняя плотность, T и P – возмущения температуры и плотности относительно средних T_0 и P_0 , вызванные движением жидкости, $\mathbf{g} = g\hat{r}$ – ускорение свободного падения, $\boldsymbol{\Omega}$ – угловая скорость вращения системы координат, α – коэффициент теплового расширения и β – субадиабатический температурный градиент. Уравнения рассматриваются в сферической системе координат с применением приближения тонкого слоя [1]. Выбраны граничные условия, соответствующие изотермическим, непроницаемым и свободным от тангенциальных напряжений границам слоя.

Для численного моделирования использованных уравнений разработан спектральный метод, в основе которого лежит разложение поля по сферическим функциям. Производные по радиусу получены с помощью разложения по полиномам Чебышева. Дискретизация по времени достигается с помощью смешанной полуявной схемы: для линейных членов применяется неявная схема Кранка-Николсона, для нелинейных используется явный метод Адамса-Башфорта [2]. Для реализации метода разработан оригинальный код в программной среде MATLAB. Все вычисления выполнены на сетке с разрешением 256x128x30 по широте, долготе и радиусу соответственно. Обсуждаются результаты моделирования трехмерной затухающей турбулентности, исследовано влияние вращения на устойчиво стратифицированные турбулентные течения.

Литература

1. *Miesch M.S.* Numerical modeling of the solar tachocline. I. Freely evolving stratified turbulence in a thin rotating spherical shell // *The Astrophysical Journal*. 2001. V. 562, N 2. P. 1058.
2. *Clune T.C. et al.* Computational aspects of a code to study rotating turbulent convection in spherical shells // *Parallel Computing*. 1999. V. 25, N 4. P. 361–380.

Перенос излучения в сильно замагниченной плазме

Т.А. Пухов, Д.А. Румянцев

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

В работе рассмотрено уравнение Больцмана для функции распределения фотона с учетом процессов рассеяния и расщепления фотона в в нерелятивистском, сильно замагниченном равновесном электронном газе. Получено уравнение типа Компанейца для функции распределения фотона и найдено его аналитическое решение.

Мы будем рассматривать сильно замагниченную плазму электронов, в которой имеет место иерархия малостей $\beta \ll m^2 \ll T^2, \mu^2$, где $\beta = eB$ – параметр малости поля (Используется естественная система, $c = h = k_B = 1$, $e > 0$ – элементарный заряд). Характерный масштаб магнитного поля $B_e = m^2 / e$; 4.41×10^{13} Гс.

Решение задачи о переносе излучения эквивалентно решению системы уравнений Больцмана [1]. А система уравнений Больцмана в магнитном поле [2]:

$$\frac{\partial f^\lambda}{\partial t} + (\hat{n}, \nabla f^\lambda) = St_{scatt}^\lambda + St_{split}^\lambda \quad (1)$$

где f^λ – функция распределения фотона поляризации $\lambda=1,2$, \hat{n} – единичный вектор, который показывает направление распространения фотона. St_{scatt}^λ и St_{split}^λ – интегралы столкновений, учитывающие процессы рассеяния фотонов ($\gamma^\lambda e \rightarrow \gamma^{\lambda'} e$) и расщепления ($\gamma^\lambda \rightarrow \gamma^{\lambda'} \gamma^{\lambda''}$) соответственно, которые имеют вид

$$St_{scatt}^\lambda = \int \sum_{\lambda'=1}^2 dW_{\lambda \rightarrow \lambda'} [f^{\lambda'}(1+f^\lambda)f_{E'}(1-f_E) - f^\lambda(1+f^{\lambda'})f_E(1-f_{E'})] \quad (2)$$

$$St_{split}^\lambda = \int \sum_{\lambda', \lambda''=1}^2 dW_{\lambda \rightarrow \lambda' \lambda''} [f^{\lambda'} f^{\lambda''} (1+f^\lambda) - f^\lambda (1+f^{\lambda'}) (1+f^{\lambda''})], \quad (3)$$

где $f^\lambda = f^\lambda(t, \mathbf{r}, \theta, \theta')$, $f^{\lambda'} = f^{\lambda'}(t, \mathbf{r}, \theta, \theta')$, $f^{\lambda''} = f^{\lambda''}(t, \mathbf{r}, \theta, \theta')$, а $f_E = [1 + \exp[E/T]]^{-1}$ – равновесная функция распределения электронов, после реакции она будет со штрихом. Коэффициенты поглощения $dW_{\lambda \rightarrow \lambda'}$, $dW_{\lambda \rightarrow \lambda' \lambda''}$ для кинематически разрешенных каналов можно взять из работы [3].

Кинематически разрешенные каналы для реакции расщепления $1 \rightarrow 12$, $1 \rightarrow 21$, $1 \rightarrow 22$, а канал $2 \rightarrow 11$ в нашем случае будет подавлен частотой. Оценив длину свободного пробега фотонов получим что мода $\lambda=2$ быстро приходит в равновесие со средой для слоя толщиной $\sim 10^2$ см. Функция распределения фотона моды 2 – приближенно равновесная.

В случае сильно замагниченной нерелятивистской плазмы оказалось возможным свести систему уравнений Больцмана (1) к дифференциальным уравнениям и найти их решения. Для этого рассмотрим следующее приближение: плоскопараллельная задача, однородное магнитное поле, $T = \text{const}$ и стационарный поток фотонов. Функцию распределения фотона моды 2 будем считать приближенно равновесной $f^{\lambda=2} = f_2 = [e^x - 1]^{-1}$, где $x = \omega / T$. Пренебрегая индуцированным излучением после суммирования по поляризациям уравнений системы (1) и разложения в пределе $\omega \ll m$, получим

$$\text{ш } x^5 \int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2)^3 \bar{f}(x, \xi) = \frac{8}{3} \int_{-1}^1 d\xi \left(\xi^2 + \frac{2}{5} \right) \times \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ x^6 \left(\frac{\partial}{\partial x} + 2f^{(2)} + 1 \right) \right\} \bar{f}(x, \xi) + \frac{4}{15} \int_{-1}^1 d\xi \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} [x^5 \bar{f}(x, \xi)] \quad (0.7)$$

$$\bar{f}(x, \xi) = f^{(1)}(x, \xi) - \frac{1}{e^x - 1}, \quad \text{ш } = \frac{\alpha (eB)^2 T^2}{1080 \pi^2 m^3 n_e}, \quad n_e \approx eB \sqrt{\frac{mT}{2\pi^3}} e^{-(m-\mu)/T} \quad (4)$$

Кси находится, в симметричных пределах, так как присутствует симметрия связанная с выбранной системой координат. коэффициент каппа является константой в пределах слоя и введен с целью упрощения обозначений. Подставляя в (2) разложение функции распределения фотонов по полиномам Лежандра:

$$\bar{f}(x, \xi) = \sum_{l=0}^{\infty} S_l(x) P_l(\xi), \quad \xi = \cos \theta. \quad (5)$$

В пределе $x \ll 1$, ($\omega \ll T$), получим следующее решение:

$$S_0(x) \propto x^{2/11}, \quad S_2(x) \propto x^{\frac{1}{2}(\sqrt{57}-7)}. \quad (6)$$

Спектр излучения которых имеет степенной вид:

$$x^3 f^{(1)}(x, \xi) = \frac{x^3}{e^x - 1} + A_1 x^{35/11} + A_2 x^{\frac{1}{2}(\sqrt{57}-1)} P_2(\xi) \quad (7)$$

A_1 и A_2 – постоянные, которые можно найти из условия задания плотности энергии фотонов, ε_γ .

В пределе же $x \gg 1$ или, что эквивалентно $\omega \gg T$, получим решения вида

$$S_0(x) \propto \exp[-x/2] \sqrt{\frac{\frac{1}{4} + a_2 \mu x}{3(a_2 \mu)^{2/3}}} K_{1/3} \left(\frac{2(\frac{1}{4} + a_2 \mu x)^{3/2}}{3(a_2 \mu)} \right), S_2(x) \propto \exp[-x/2] J_{1/3}(x), \quad (8)$$

где $K_{1/3}(x)$ и $J_{1/3}(x)$ – функции Макдональда и Бесселя соответственно. Спектр излучения которого является экспоненциально подавленным и соответствует Виновскому закону. Остальные члены разложения будут равны нулю $S_1 = 0$.

Литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П., Физическая кинетика. М.: Наука, 1979.
2. Любарский Ю.Е., Комptonизация в сверхсильном магнитном поле // Астрофизика. 1988. Т. 28, № 1. С. 183–191.
3. Chistyakov M.V., Romyantsev D.A., Stus' N.S, Photon splitting and Compton scattering in strongly magnetized hot plasma // Phys. Rev. 2012. V. D86. P. 043007.

УДК 520.343

Использование управляемых летательных аппаратов для калибровок установок, регистрирующих черенковский свет от ШАЛ

Д.М. Воронин

Институт ядерных исследований РАН

Эксперименты, регистрирующие черенковское излучение от широких атмосферных ливней, в основном представляют собой разнесённые друг от друга на некоторой площади оптические модули. Расстояние между модулями варьируется от эксперимента к эксперименту, но средним значением можно считать расстояние ~ 100 м, а сами детекторы могут размещаться на площади до нескольких км². К таким установкам относятся AIROBICC, Tunka-133, TAIGA-HiSCORE, ЯКУШАЛ и т.д.

В процессе работы возникает задача калибровки всей установки. В случае предлагается использование сверхъяркого светодиодного источника, который будет закреплён на управляемом летательном аппарате, способном подняться на несколько сотен метров над установкой. В данной системе предполагается использование светодиода на основе InGaN, высоковольтного светодиодного драйвера на лавинных транзисторах, системы питания и модуля генерации тактовых запускающих импульсов. В таком случае длительность световых импульсов может достигать 2–3 нс, а количество фотонов в каждом импульсе 10^{10} – 10^{11} .

Носителем для светодиодного источника можно выбрать любой мультироторный аппарат, начиная с квадрокоптера. Современные возможности этих летательных аппаратов по эффективности винтомоторной группы, грузоподъёмности, точности позиционирования, используя системы спутниковой навигации, делают его пригодным для выполнения задачи калибровки черенковских детекторов, поз-

воля охватить за один сеанс калибровки как можно большее количество отдельных оптических модулей. Такой аппарат способен поднять светодиодный источник на необходимую высоту и зафиксироваться в пространстве с достаточной точностью на время необходимое для проведения калибровочных измерений.

Применение управляемых аппаратов позволяет избавиться от необходимости прокладывания дополнительных оптоволоконных линий, а также отсутствуют проблемы, связанные со взаимным размещением оптических модулей и других конструкций, которые могут мешать распространению света.

УДК 520.2

Баксанский большой нейтринный телескоп: текущий статус

Н.А. Ушаков

Институт ядерных исследований РАН

На Баксанской нейтринной обсерватории Института ядерных исследований РАН (БНО ИЯИ РАН), располагаемой в горах Кавказа, предполагается создать детектор нейтрино большого объема на основе жидкого сцинтиллятора с массой мишени 10 кт [1].

Этот многоцелевой нейтринный детектор для регистрации потоков нейтрино и антинейтрино от Солнца, Земли и астрофизических источников будет расположен в подземной зоне БНО на глубине около 4700 метров водного эквивалента.

Детектор будет на порядок больше по рабочему объёму, чем самый чувствительный существующий нейтринный детектор на основе жидкого сцинтиллятора, Bogerino [2], и один из крупнейших из всех запланированных детекторов, использующих тот же метод. Помимо десятикратного увеличения объёма, будет значительно снижен фон, затрудняющий идентификацию сигналов нейтрино, который определяется глубиной, новыми методами очистки сцинтиллятора и удалённостью Баксанской нейтринной обсерватории от промышленных ядерных реакторов – атомных электростанции. По последнему параметру БНО – одна из лучших подземных лабораторий, в которых планируется разместить крупномасштабные нейтринные телескопы [3].

Научные проблемы, на решение которых будет направлена работа сцинтилляционного детектора нейтрино нового поколения:

- Измерение потоков антинейтрино от бета-распадов изотопов естественных радиоактивных семейств ^{238}U и ^{232}Th , а также ^{40}K , содержащихся в земных недрах (геонейтрино). Надежная регистрация этих частиц позволит установить вклад энерговыделения от радиоактивного распада указанных изотопов в общий тепловой поток Земли; проверить гипотезу о протекании в центре Земли цепной реакции деления путем поиска потока антинейтрино от «геореактора»; определить соотношение Th/U внутри планеты, что позволит дать ответ на ряд актуальных вопросов о внутреннем устройстве, происхождении и эволюции нашей планеты;
- Регистрация нейтрино от Солнца, образующихся в реакциях захвата протонов ядрами C , N , O и F , а затем позитронного распада образовавшихся ядер (так называемый цикл CNO). Измерение потока этих нейтрино позволит определить с высокой точностью химический состав солнечных недр, что является особенно актуальным в контексте современных трудностей согласования наблюдений химического состава фотосферы с данными гелиосейсмологии («новая проблема солнечных нейтрино»);
- Регистрация изотропного потока антинейтрино, накопившихся во Вселенной в результате гравитационных коллапсов ядер массивных звёзд и образования нейтронных звёзд и черных дыр.
- Изучение динамики взрывов сверхновых путем регистрации интенсивности и спектра нейтринной вспышки, в случае взрыва сверхновой с коллапсирующим ядром на расстоянии до 200 кпк.
- Регистрация совокупного потока антинейтрино от всех имеющихся на Земле энергетических ядерных реакторов.

Проект детектора включает четыре этапа. В настоящее время завершена первая стадия, которая включала разработку, моделирование [4] и запуск прототипа с массой жидкого сцинтиллятора 0.5 тонны. На данном этапе были отработаны основные методики, а в настоящее время с его помощью производится измерение потока мюонов в лаборатории.

Второй этап проекта, 5-тонный прототип, который находится на стадии сборки детектора, помимо увеличения объёма сцинтиллятора, подразумевает ряд качественных улучшений, например, использование концентраторов света.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 17-12-01331) и выполнена на Баксанской нейтринной обсерватории ИЯИ РАН (Центр коллективного пользования) при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации: номер договора 075-15-2019-1640, уникальный идентификатор проекта RFMEFI62119X0025.

Литература

1. *Ushakov N.A et al.* New large-volume detector at the Baksan Neutrino Observatory: Detector prototype // J. Phys.: Conf. Ser. 2021, 1787 012037.
2. *Agostini M. et al.* Spectroscopy of geoneutrinos from 2056 days of Borexino data // Physical Review D. 2015, V. 92. P. 031101.
3. *Wan L., Hussain G., Wang Z. and Chen S.* Geoneutrinos at Jinping: Flux prediction and oscillation analysis // Physical Review D. 2017, V. 95. P. 053001.
4. *Malyshkin Yu.M. et al.* Modeling of a MeV-scale particle detector based on organic liquid scintillator // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A. 2020, V. 951. P. 162920.

УДК 524.3-52

Сравнение алгоритмов восстановления интерферометрических изображений по инфракрасным данным с прибора MATISSE

Н.С. Никонова¹, П.Э. Боли¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Для увеличения углового разрешения в наблюдательной астрофизике применяется интерферометрический метод, при котором один объект наблюдается одновременно сетью телескопов, формируя интерференционную картину. Результирующее угловое разрешение при этом будет определяться максимальным расстоянием между телескопами (базой). Измеряемая величина – *функция видности*, является свёрткой исходного изображения объекта и функции рассеяния точки, которая зависит от пространственного распределения массива телескопов. Восстановление исходного изображения является обратной задачей, различные алгоритмы решения которой будут продемонстрированы в данной работе на примере наблюдений конкретного объекта.

В работе представлены наблюдения объекта Беклина-Нойгебауэра AFGL 4176. Данные были получены на приборе MATISSE интерферометра VLTI в среднем инфракрасном диапазоне L (3–4 мкм). В наблюдениях использовались базы АТ телескопов длиной 8–130 м, такой широкий диапазон совместно с длительностью экспозиции позволили получить плотное покрытие плоскости пространственных частот. Для восстановления изображения использовались такие алгоритмы, как SQUEEZE, IRBiS и ehtim. Кроме этого, проведён компонентный анализ данных с использованием пакета PMOIRE, по результатам которого были оценены физические характеристики компонент.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 18-72-10132.

Литература

1. *Chris Haniff* An introduction to the theory of interferometry // NewAR 51 (2007) 565–575.
2. *Florentin Millour* Interferometry concepts // EAS 69–70 (2015).
3. *Damien Ségransan* Observability and UV coverage // NewAR 51 (2007) 597–603.
4. *Jean P. Berger, Damien Ségransan* An introduction to visibility modeling // NewAR 51 (2007) 576–582.
5. *Andreas Glindemann* Principles of Stellar Interferometry // A&A Library (2011).

Проектирование системы компенсации магнитного поля для прототипа Большого Баксанского нейтринного телескопа

А.Д. Луканов

Институт ядерных исследований РАН

Прототип Большого Баксанского нейтринного телескопа располагается в Баксанской Нейтринной обсерватории на Кавказе. В прототипе будут использоваться 8- и 10-дюймовые фотоэлектронные умножители. В любой точке Земли существует магнитное поле, которое определяется полным вектором напряженности. Проекция этого вектора на горизонтальную поверхность и вертикальное направление, а также углы, составленные этим вектором с координатными осями, носят название главных элементов магнитного поля. Магнитное поле, даже таких малых значений, влияет на характеристики ФЭУ. Влияние на фотоумножители больших размеров особенно заметно. Таким образом, важно использовать систему компенсации магнитного поля.

Одним из способов является использование специальных материалов с высокой магнитной, таких как пермаллой. Однако недостатками данного метода являются дороговизна материала, сложность в создании конструкции, так как каждый ФЭУ необходимо изолировать отдельно. Активным способом компенсации является использование колец Гельмгольца, системы идентичных катушек, по которым течет электрический ток. В центре между кольцами создается область однородного магнитного поля. Используя разные комбинации данных колец, можно компенсировать все три компонента поля.

Написание программы для расчета параметров производилось на языке программирования Python. В результате были получены: сила тока, количество витков и расположение колец (рис. 1).

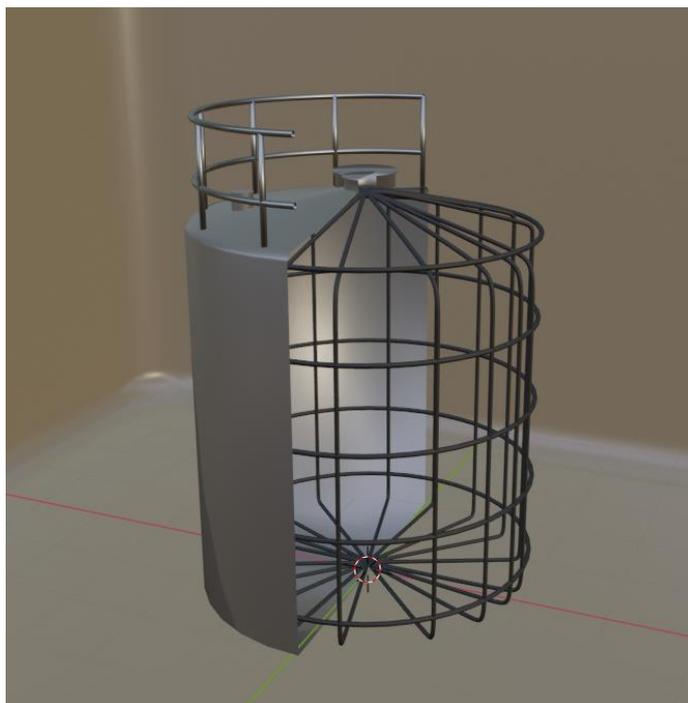


Рис. 1. Конфигурация колец Гельмгольца

Литература

1. *Sinev V. V. et al.* // 2017 Phys. Atom. Nuclei 80 446–54.
2. *Malyshkin Yu.M. et al.* // 2020 Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A 951 162920.
3. *Ma K J et al.* // 2011 Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A 629 93–100.
4. *Barros N. et al.* // 2016 arXiv:1512.06916v2.
5. *Хмелевской В.К.* Основы геофизических методов, Пермь 2010.

Идентификация тепловых нейтронов с применением машинного обучения в эксперименте ENDA

К.О. Куринов¹

¹Институт ядерных исследований РАН

В рамках проекта LHAASO (large high altitude air shower observatory) в Тибете создается установка ENDA (electron neutron detector array). На территории ИЯИ РАН в Москве создан прототип кластера установки ENDA из 16 электронно-нейтронных детекторов для изучения широких атмосферных ливней с энергиями выше 1 ПэВ. Концепция установки состоит в одновременной регистрации электромагнитной и адронной компоненты ШАЛ, с помощью эн-детекторов (разработанных в ИЯИ РАН) на основе неорганического скинтилляционного компаунда $ZnS(Ag) + V_2O_5$ с необогащенным бором. Идентификация зарегистрированных нейтронов основана на различии формы импульсов, образовавшихся в результате регистрации нейтронов и легких заряженных частиц. Для легких заряженных частиц характерна небольшая длительность импульса, в то время как при прохождении тяжелых заряженных частиц, которые являются продуктами реакции захвата тепловых нейтронов, длительность импульса значительно больше. Для разделения этих импульсов в данной работе применялись сверточные нейронные сети (CNN).

Литература

1. Щеголев, О.Б., Алексеенко, В.В., Кулешов, Д.А., Лёвочкин, К.Р., Стенькин, Ю.В. (2021). Первые результаты, полученные на установке из 16 электронно-нейтронных детекторов в ИЯИ РАН. Известия РАН. Серия физическая, 85(4), 548–551.
2. Воронцов К. В. Математические методы обучения по прецедентам (теория обучения машин) // Москва. 2011. С. 119–121.

Вероятностное распределение звезд в Галактике по спектральным классам

В.А. Муха, П.Э. Боли

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Целью работы является использование данных, полученных из различных открытых каталогов, для определения спектральных классов звезд и параметра межзвездного поглощения.

Основными входными данными для анализа являются кривые пропускания фильтров, звездные величины объектов, пересчитанные в потоки ($эрг/см^2/с$), и ошибка наблюдаемых величин. Наблюдаемые потоки в дальнейшем сравниваются со значениями из модельных спектров. В данной работе используются такие приближения как закон Рэлея–Джинса, удобно аппроксимирующий кривую для горячих звезд, функция Планка и модели звездных атмосфер.

Теоретические спектры объектов задаются с варьирующимися параметрами, такими как покраснение и переменная, включающая в себя константы (1 случай) и значения, требующие дополнительной оценки (2, 3 случай), которые и вносят свой вклад в определение спектрального класса звезды. Благодаря приближению функцией Планка также становится возможна оценка одного из трех параметров для звезды (радиуса, эффективной температуры или светимости) по двум другим:

$$L = 4\pi\sigma R^2 T_{eff}^4 \quad (1)$$

$$R = \sqrt{L_{bol} / (4\pi\sigma T_{eff}^4)} \quad (2)$$

Оценка и выбор параметров приближения спектрального распределения энергии проводится с помощью минимизации редуцированного χ^2 (хи-квадрат).

Дальнейший анализ полученных параметров в различных моделях проводится с помощью Байесовской статистики, которая вносит вероятностную оценку в определение новых данных, что дает лучшее представление и приближение для неизвестных переменных.

Итогом работы является распределение звезд по их спектральным классам по всей Галактике, что впоследствии позволяет составить карту звездного неба с вероятностным описанием параметров для видимых объектов на нем. Основным преимуществом приведенной работы является возможность массового анализа, то есть получение статистической оценки параметров сразу для целых областей Галактики, а не только для конкретных объектов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-72-10132

УДК 533.951.7

Нелинейные преобразования кинетической и магнитной энергий в двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на бета-плоскости

Т.А. Зиняков, А.С. Петросян

Институт Космических Исследований РАН

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В работе представлены результаты аналитического и численного исследования двумерной однородной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β -плоскости. Изучение фундаментальных свойств такой турбулентности позволяет понять эволюцию различных астрофизических объектов: магнитоактивных атмосфер экзопланет, Солнечного тахоклина, атмосфер нейтронных звезд. В наших предыдущих работах [1–2] исследуются зональные потоки и спектры в двумерной затухающей однородной магнитогидродинамической турбулентности на β -плоскости. В работе [1] при помощи численного моделирования показано образование зональных потоков в такой турбулентности. В работе [2] приведены спектры такой турбулентности и показано, что нарушение самоподобного затухания спектра Ирошникова-Крейчмана, связанное с нелинейными преобразованиями кинетической и магнитной энергий, приводит к образованию спектра Колмогорова и обратному каскаду кинетической энергии. Качественный анализ потоков кинетической, магнитной и полной энергии, а также квадрата потенциала магнитного поля в двумерной магнитогидродинамической турбулентности на β -плоскости позволяет понять причину нелинейных преобразований энергии в такой турбулентности.

Для качественного анализа и численного моделирования двумерной однородной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β -плоскости используются уравнения эволюции завихренности ω и потенциала магнитного поля a :

$$\omega_t = J(\psi, \omega) + \beta \cdot \psi_x + J(a, \Delta a) + \nu \Delta \omega, \quad (1)$$

$$a_t = J(\psi, a) + \eta \Delta a, \quad (2)$$

где ψ – функция тока ($\omega = -\Delta \psi$), ν – коэффициент вязкости и η – магнитная диффузия. Запись вида $J(f, g) = f_x g_y - f_y g_x$ является Якобианом функций f и g .

Качественный анализ уравнений (1–2), а именно анализ интегралов движения уравнений (1–2) и их составляющих, показал наличие связи между спектральным потоком магнитной энергии и спектральным потоком квадратом потенциала магнитного поля. Наличие в двумерной магнитогидродинамической турбулентности обратного каскада квадрата потенциала магнитного поля и существование данной связи между потоками являются ключевыми факторами возникновения нелинейных преобразований энергии в такой турбулентности, приводящих к нарушению энергообмена. Для подтверждения полученных аналитических результатов проведены численные моделирования двумерной однородной затухающей магнитогидродинамической турбулентности без вращения и при наличии вращения в приближении β -плоскости.

Для численного моделирования системы (1–2) с высоким пространственным разрешением (8192×8192) используется псевдоспектральный метод основанный на быстром преобразовании Фурье. Для исключения фиктивных решений, возникающих в таком методе, ошибки фильтруются (де-алиасинг) по правилу 2/3. Для интегрирования по времени системы уравнений (1–2) используется схема Рунге–Кутты третьего порядка (трехшаговая схема с весами). Численное моделирование производилось на графических процессорах Nvidia GeForce и Nvidia Tesla с использованием параллельных вычислений программно-аппаратной архитектуры CUDA.

Результаты численного моделирования системы уравнений (1–2) показали, что связь между потоками магнитной энергии и квадратом потенциала магнитного поля существует не только в двумерной магнитогидродинамической турбулентности без вращения, но и в двумерной магнитогидродинамической турбулентности с вращением в приближении β -плоскости. Причем при наличии вращения поток квадрата потенциала меняется со временем другим образом по сравнению с случаем без вращения: обратный каскад квадрата потенциала в области средних и крупных масштабов уменьшается с увеличением параметра Россби β . Так как поток квадрата потенциала связан с потоком магнитной энергии, меняется и скорость передачи энергии от кинетической к магнитной на крупных масштабах, что в свою очередь приводит к возникновению сильного дисбаланса энергий. Результаты численного моделирования подтверждают полученные аналитические результаты, а также позволяют понять качественный механизм передачи энергии в такой турбулентности.

Работа поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «Базис» и выполнена при поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований № 19-02-00016 и № 20-32-90001.

Литература

1. *Зиняков Т.А., Петросян А.С.* Зональные течения в двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β -плоскости // Письма в ЖЭТФ 2018. Т. 108(2). С. 75.
2. *Зиняков Т.А., Петросян А.С.* Спектры двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β -плоскости // Письма в ЖЭТФ 2020. Т. 111 (2). С. 65.

Секция лазерных систем и структурированных материалов

УДК 537.9

Особенности анизотропии магнетосопротивления в редкоземельных додекаборидах RB_{12} ($R=Ho, Er, Tm$) с динамическими зарядовыми страйпами

К.М. Красиков¹, А.Н. Азаревич¹, В.В. Глушков¹, С.В. Демидов¹, А.В. Богач¹, Н.Ю. Шицевалова²,
В.Б. Филиппов², Н.Е. Случанко¹*

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

²Институт проблем материаловедения им. И.М. Францевича НАНУ

Магнетики с фрустрированным основным магнитным состоянием привлекают существенное внимание в силу набора аномальных свойств, потенциально применимых на практике. Среди них антиферромагнетики из семейства редкоземельных додекаборидов RB_{12} ($R = Ho, Er, Tm$) представляют особый интерес, так как, обладая сравнительно простой ГЦК-решеткой, демонстрируют сложную несоразмерную антиферромагнитную структуру. Недавно в немагнитном реперном соединении LuB_{12} [1] было обнаружено формирование вдоль направления $[110]$ динамических зарядовых страйпов, возникающих в результате динамического кооперативного эффекта Яна–Теллера на кластерах B_{12} . Подобная электронная неустойчивость должна присутствовать в антиферромагнетиках HoB_{12} , ErB_{12} и TmB_{12} , так как она присуща именно борной подрешетке. В связи с этим, отдельный интерес представляет изучение механизмов рассеяния носителей заряда в таких системах с одновременным наличием несоразмерной магнитной структуры и динамических зарядовых страйпов.

Исследование додекаборидов с антиферромагнитным упорядочением показало наличие сильнейшей анизотропии магнетосопротивления (МС) ниже T_N , причем было установлено, что вид анизотропных фазовых (Н-ф) диаграмм различается: у HoB_{12} и TmB_{12} фазовые границы имеют форму «мальтийского креста» [2], в то время как в ErB_{12} реализуется анизотропия фазовой диаграммы в форме «бабочки». Такое изменение положения фазовых границ для различных магнитных РЗ додекаборидов может быть связано с различным основным состоянием РЗ ионов в кристаллическом поле (Γ_5^1 для HoB_{12} и TmB_{12} и Γ_8^3 для ErB_{12} [3]) и с различным вектором АФ-упорядочения ($(1/2\pm\delta, 1/2\pm\delta, 1/2\pm\delta)$ для HoB_{12} и TmB_{12} и $(3/2\pm\delta, 1/2\pm\delta, 1/2\pm\delta)$ для ErB_{12} [4]). Несмотря на большой объем доступных экспериментальных результатов, качественного и количественного сравнительного анализа МС в этих додекаборидах до сих пор не проводилось.

Ранее было показано [5], что в АФ-состоянии HoB_{12} зависимости МС от магнитного поля можно описать суммой линейного положительного и квадратичного отрицательного вкладов во внешнем магнитном поле. Коэффициенты A и B , которые определяют два различных механизма рассеяния носителей заряда на (i) волне спиновой плотности и (ii) локальных $4f-5d$ спиновых флуктуациях, были получены и детально проанализированы. В [6] было показано, что наличие в соединении ферромагнитной компоненты намагниченности может приводить к возникновению отрицательного линейного магнетосопротивления и появлению аномалии в окрестности точки Кюри T_C . В настоящей работе приводится анализ с разделением вкладов для HoB_{12} и ErB_{12} и сравнение эволюции механизмов рассеяния при изменении температуры и магнитного поля для HoB_{12} , ErB_{12} и TmB_{12} .

В работе представлены результаты измерения удельного сопротивления HoB_{12} , ErB_{12} и TmB_{12} в диапазоне температур 1.7–10 К, в магнитном поле до 80кЭ, направленном вдоль основных осей в ГЦК-кристалле ($\mathbf{H}||[001]$, $\mathbf{H}||[110]$ и $\mathbf{H}||[111]$), а также угловых зависимостей магнетосопротивления. Измерение удельного сопротивления проводилось в ИОФ РАН на оригинальной автоматизированной установке для гальваномагнитных исследований. Использовался стандартный четырехконтактный метод измерения сопротивления на постоянном токе с коммутацией тока через образец.

Обнаруженная сильная угловая анизотропия МС и найденных коэффициентов A и B (линейный вклад переменного знака и квадратичный отрицательный вклады соответственно), крайне нетипичная для ГЦК-кристалла, объясняется наличием в рассматриваемых кристаллах RB_{12} конкуренции между

различными механизмами, связанными с рассеянием (i) на ферромагнитных доменах наноразмера, (ii) на волне спиновой плотности и (iii) на локальных $4f$ - $5d$ спиновых флуктуациях, а также является следствием сильной перенормировки косвенного РККИ-обмена через электроны проводимости из-за перераспределения носителей заряда в квантовые колебания (динамические полосы заряда), направленные вдоль $[110]$.

Литература

1. Bolotina N.B., Dudka A.P., Khrykina O.N., Krasnorussky V. N., Shitsevalova N.Y., Filipov V. B., Sluchanko N.E., The lower symmetry electron-density distribution and the charge transport anisotropy in cubic dodecaboride LuB12 // J. Phys. Condens. Matter. 2018. V. 30 265402.
2. Krasikov K., Glushkov V., Demishev S., Khoroshilov A., Bogach A., Voronov V., Shitsevalova N., Filipov V., Gabáni S., Flachbart K., Suppression of indirect exchange and symmetry breaking in the antiferromagnetic metal HoB12 with dynamic charge stripes // Phys. Rev. B. 2020. V. 102 214435.
3. Czopnik A., Shitsevalova N., Krivchikov A., Pluzhnikov V., Paderno Y., Onuki Y., Thermal properties of rare earth dodecaborides // J. Solid State Chem. 2004. V. 177 507–514.
4. Siemensmeyer K., Flachbart K., Gabáni S., Mařaš S., Paderno Y., Shitsevalova N., Magnetic structure of rare-earth dodecaborides // J. Solid State Chem. 2006. V. 179 2748–2750.
5. Krasikov K.M., Bogach A. V., Bozhko A.D., Glushkov V. V., Demishev S. V., Khoroshilov A.L., Shitsevalova N.Y., Filipov V. B., Gabáni S., Flachbart K., Sluchanko N.E., Anisotropy of the charge transport in Ho11B12 antiferromagnet with dynamic charge stripes // Solid State Sci. 2020. V. 104 106253.
6. Yamada H., Takada S., Negative Magnetoresistance of Ferromagnetic Metals due to Spin Fluctuations // Prog. Theor. Phys. 1972. V. 48 1828–1848.

УДК 537.9

Магнитные и магнитоэлектрические свойства тройной спиральной магнитной структуры на примере Fe-лангаситов

А.Ю. Тихановский¹, А.А. Мухин¹, В.Ю. Иванов¹, А.М. Кузьменко¹

¹ Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН (Федеральный исследовательский центр)

Недавно был обнаружен интересный класс соединений, проявляющих магнитоэлектрические свойства – железосодержащие соединения со структурой лангасита, такие как $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$, $\text{Ba}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ и $\text{Sr}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$. Кристаллическая структура Fe лангаситов относится к пространственной группе $R\bar{3}21$ и является нецентросимметричной. При температурах ниже точки Нееля ($T_N \sim 27\text{K}$) они упорядочиваются антиферромагнитно в структуру с двойной киральностью (внутриплоскостное треугольное упорядочение спинов Fe^{3+} , вращающихся вдоль оси c) [1]. Симметрия кристаллов допускает существование магнитоэлектрического эффекта, однако проведенные ранее исследования электрической поляризации оказались противоречивыми [2–4], кроме того, остаются неясны механизмы возникновения магнитоэлектрического эффекта в соединениях. В работе выполнен феноменологический анализ магнитных и магнитоэлектрических свойств Fe-лангаситов и предложено упрощенное описание поведения сложной спиновой структуры в магнитном поле, отражающее ее основные черты.

С использованием симметричного анализа построены базисные функции магнитного представления пространственной группы $R\bar{3}21$ и произведена параметризация магнитной спиральной структуры в предположении преобладающего обменного взаимодействия по сравнению с анизотропными и зеемановскими взаимодействиями. В результате предложено «сокращенное» описание спиральной магнитной структуры, в рамках которого плоскость тройной магнитной спирали задается ориентацией двух векторов антиферромагнетизма \mathbf{B}_1 и \mathbf{B}_2 , а ее скос вектором намагниченности \mathbf{M} . Показано, что под действием внешнего магнитного поля магнитная спираль переориентируется перпендикулярно направлению последнего (аналог спин-флоп перехода) с возникновением скоса рис. 1.

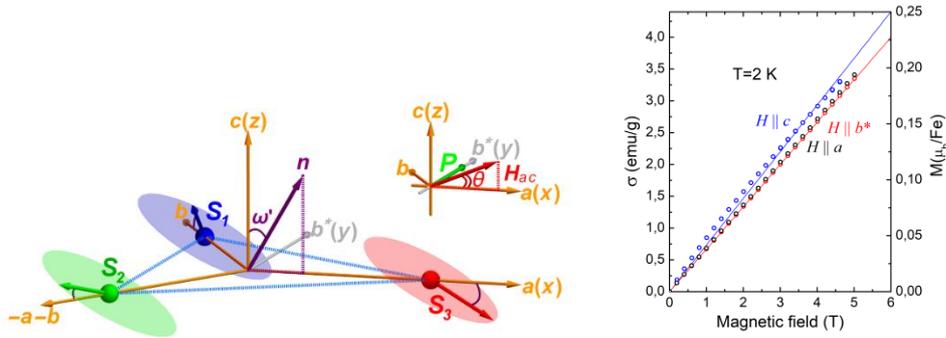


Рис. 1. а) Переориентация нормали треугольной магнитной спирали $\mathbf{n}(\omega', \varphi')$ под действием магнитного поля \mathbf{H} , направленного в ас-плоскости ($\varphi_H = \pi/2$), под углом θ_H к ab -плоскости (см. вложенный рисунок). ω' – отклонение нормали от волнового вектора \mathbf{k} (с-оси). б) Полевая зависимость намагниченности $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ при температуре 2 К. Точками показаны экспериментальные результаты. Сплошными линиями – моделирование. Синим, показана ориентация магнитного поля $\mathbf{H} \parallel c$, красным $\mathbf{H} \parallel b^*$ и черным $\mathbf{H} \parallel a$

Согласованно описаны экспериментальные данные по магнитоэлектрическому эффекту в различных геометриях, в широком диапазоне магнитных полей. Установлено, что небольших полях (до 8Т) основной вклад в поляризацию связан с переориентацией магнитной спирали перпендикулярно полю, а направление вращения спирали определяется отклонением поля от базисной плоскости. Обнаруженное в этой области полей резкое возрастание поляризации, в полях близких к базисной плоскости, может свидетельствовать о вкладе в поляризацию от обратного взаимодействия Дзялошинского–Мория в Fe-лангаситах. Показано, что изменение характера поведения электрической поляризации в сильных полях (свыше 10 Т) связано со скосом спирали, что может быть обусловлено как обменным Fe-Fe взаимодействием, так и одноионной анизотропией.

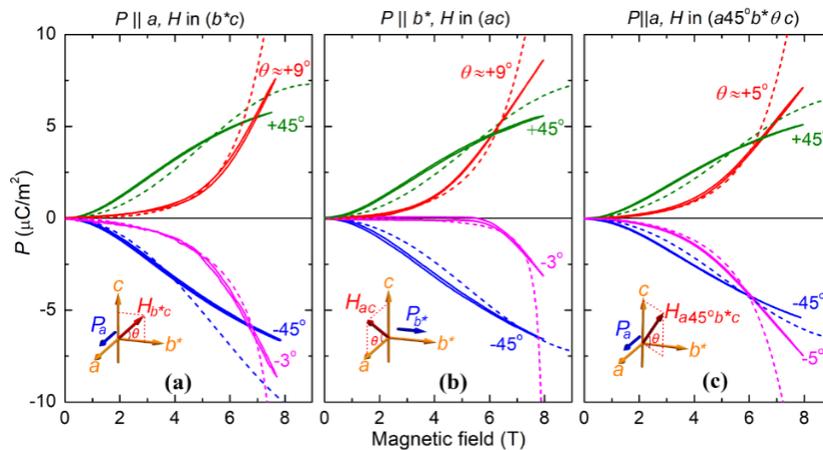


Рис. 2. Зависимость электрической поляризации $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ при температуре $T=9\text{K}$. а) вдоль оси a , от магнитного поля, направленного в плоскости bc , б) вдоль оси b^* от поля, направленного в плоскости ac , в) вдоль оси a от поля, направленного под углом θ_H к диагонали в плоскости ab^* . На вставках показано взаимное расположение вектора магнитного поля и вектора поляризации, θ_H – угол отклонения от плоскости ab^* . Сплошными линиями показаны экспериментальные результаты, где небольшой гистерезис носит аппаратурный характер, пунктирными – моделирование

Совокупность полученных результатов свидетельствует о том, что поляризация может быть чувствительным методом для изучения трансформаций магнитной структуры в поле.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 16-12-10531).

Литература

1. Marty K., Simonet V., Ressouche E., Ballou R., Lejay P., Bordet P. Single Domain Magnetic Helicity and Triangular Chirality in Structurally Enantiopure $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101, N 24. P. 247201. doi: 10.1103/PhysRevLett.101.247201.

- Zhou H. D., Lumata L. L., Kuhns P. L., Reyes A. P., Choi E. S., Dalal N. S., Lu J., Jo Y. J., Balicas L., Brooks J. S., Wiebe C. R. *Ba₃NbFe₃Si₂O₁₄: A New Multiferroic with a 2D Triangular Fe 3+ Motif* // *Chem. Mater.* 2009. V. 21, N 1. P. 156–159. doi: 10.1021/cm8018082.
- Lee N., Choi Y. J., Cheong S. W. Magnetic control of ferroelectric polarization in a self-formed single magnetoelectric domain of multiferroic Ba₃NbFe₃Si₂O₁₄ // *Appl. Phys. Lett.* 2014. V. 104, N 7. P. 1–5. doi: 10.1063/1.4866187.
- Narita H., Tokunaga Y., Kikkawa A., Taguchi Y., Tokura Y., Takahashi Y. Observation of nonreciprocal directional dichroism via electromagnon resonance in a chiral-lattice helimagnet Ba₃NbFe₃Si₂O₁₄ // *Phys. Rev. B.* 2016. V. 94, N 9. doi: 10.1103/PhysRevB.94.094433.

УДК 535.3

Синтез и оптические свойства 3-А-графеновых нанополос

И.В. Новиков^{1,2}, П.В. Федотов^{1,2}, Д.В. Рыбковский³, Е.Д. Образцова^{1,2}

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Сколковский институт науки и технологий

Узкие графеновые нановолокна (НПГ) с атомарно точной структурой являются наноматериалом, перспективным в таких областях как оптоэлектроника, наноэлектроника и электрохимия. Оптические свойства НПГ практически не изучены из-за сложности их производства. В этой работе использован новый для данного материала подход «снизу вверх» в рамках метода химического осаждения из газовой фазы (ГХО), нацеленный на масштабирование производства НПГ с ребром в форме кресла шириной в три атома углерода (3-АНПГ).

Для НПГ выделяют три семейства (3р, 3р+1 и 3р+2) по количеству атомов в поперечном сечении, где р – натуральное число. С уменьшением поперечного сечения в каждом семействе ширина запрещённой зоны монотонно возрастает [1]. Из-за сильного влияния структурных параметров материала на оптические и электронные свойства считается необходимым контролировать процесс синтеза на атомарном уровне.

Как правило, синтез нанополос производится методом «снизу вверх» на кристаллической поверхности Au (111) под высоким или сверхвысоким вакуумом [2]. В нашей работе демонстрируется способ производства НПГ на подложке из никелевой фольги под вакуумом порядка 10⁻³ мбар. Синтез в данных условиях является более дешёвым и масштабируемым способом производства НПГ. Высокое качество полученных плёнок было подтверждено методом комбинационного рассеяния (КР), а также их сравнением с теоретической моделью и результатами получения НПГ более сложными химическими методами [3]. Для исследования выращенных плёнок, суспендированных в растворителях НПГ, применялись методы спектроскопии оптического поглощения света (ОПС) и спектрального картирования возбуждения фотолюминесценции.

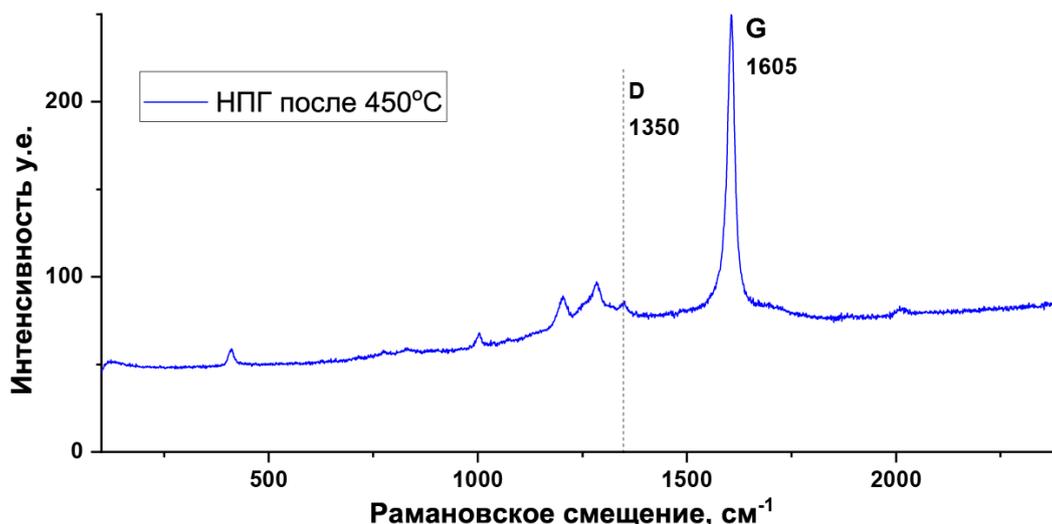


Рис. 1. Типичный спектр КР образцов нанополосок графена (НПГ). Образцы были отдельно отожжены при 250 °С с последующей термообработкой при 450 °С

Процесс синтеза с использованием прекурсора 4,4'-dibromo-p-terphenyl (ДВТР) проходит в два этапа с последовательным отжигом при 250 °С в течение 20 часов и 350 °С в течение двух часов. На первом этапе происходит полимеризация молекул прекурсора. Второй этап отжига требуется для

получения большего количества НПП. Плёнки, синтезированные по данной методике, обладают специфическими спектрами при возбуждении светом с длиной волны 325 нм. Основные моды в спектрах КР согласуются с теоретически рассчитанными для 3-АНПП. Наиболее интенсивной модой является G-мода НПП с частотой 1605 см^{-1} , связанная с режимом растяжения углеродного кольца. (рис. 1) Однако после дополнительного отжига при температурах выше 400°C в спектрах КР пленок появляется пик на 1350 см^{-1} , который может быть отнесён к индуцированной дефектами D-моду. Её появление может быть связано с частичным боковым слиянием нанополосок. Поэтому при получении атомарно точных 3-АНПП важно не перегреть образец на финальном этапе отжига.

Таким образом, модифицированный метод ГХО был впервые применён для масштабирования синтеза атомарно точных 3-АНПП в условиях низкого вакуума на подложке из никелевой фольги. В полученных вышеупомянутым методом 3-АНПП были зарегистрированы все ожидаемые колебательные моды КР, что подтверждает точность произведённых образцов. Мы считаем, что полученные результаты будут способствовать дальнейшему изучению и практическому применению нанополос графена различного типа.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-60006 и РНФ в рамках проекта № 20-42-08004.

Литература

1. *Talirz L. et al.* On-surface synthesis of atomically precise graphene nanoribbons // *Advanced materials*. 2016. Т. 28, № 29. P. 6222–6231.
2. *Narita A. et al.* Solution and on-surface synthesis of structurally defined graphene nanoribbons as a new family of semiconductors // *Chemical science*. 2019. Т. 10, № 4. P. 964–975.
3. *Abdulkarim A. et al.* A new solution to an old problem: synthesis of unsubstituted poly (para-phenylene) // *Journal of the American Chemical Society*. 2016. Т. 138, № 50. P. 16208–16211.

Секция моделирования кинетических и ядерных процессов

УДК 533 6.011

Асимптотическое обоснование эффекта перехлеста в сильно диспергированной смеси газов

М.М. Кузнецов¹, Ю.Д. Кулешова¹

¹Московский государственный областной университет

Рассмотрена асимптотическая модель явления перехлеста внутри фронта ударной волны в сильно диспергированной смеси газов, когда концентрация легкого компонента ударно сжимаемой бинарной смеси газов n_l на порядки величин превосходит концентрацию тяжелого компонента:

$$n_l \ (n_l \gg n_h, \frac{n_l}{n_h} \sim 10^{-1} - 10^3),$$

а отношение их масс находится в противоположном порядковом соотношении

$$(m_l \ll m_h, \frac{m_l}{m_h} \sim 10^{-1} - 10^{-3}).$$

Как известно, явление перехлеста [1] заключается в заметном превышении величин как макро-, так и микрохарактеристик сжимаемого газа внутри фронтов ударных волн по сравнению с их поступательно равновесными значениями за фронтом (к ним относятся, например, продольная кинетическая температура [2] и функция распределений по относительной скорости молекул [1, 2]).

Известно, что в сильно диспергированных газах этот эффект значительно усиливается [1, 2].

В настоящей работе показано, что в диспергированных смесях газов этот эффект может быть получен асимптотически точно в то время, как в более широком диапазоне значений концентраций компонент и молекулярных масс смеси газов для его аналитического обоснования требуется априорное задание функций распределений по тепловым скоростям отдельных молекул (например, Тамма–Мотт-Смита, Холвея, эллипсоидального распределения и т.д. [2]).

Установление асимптотически точного состояния, в котором реализуется эффект перехлеста и, прежде всего, для функций распределения пар молекул, является важным принципиальным фактом, т.к. при априорном задании функций распределения всегда возникает вопрос о том, действительно ли оно реализуется внутри фронта ударной волны и не является ли эффект «перехлеста» непосредственным следствием такого априорного задания?

Обоснование асимптотической точности возникающего «заброса» значений функции распределения пар молекул внутри фронта ударной волны над ее поступательно равновесным значением за фронтом связано именно с сильной диспергированностью смеси газов. Именно благодаря ей, преобладающий легкий компонент бинарной смеси газов (т.н. «носитель») быстро приходит к равновесному состоянию с соответствующей «горячей» температурой за скачком в легком компоненте бинарной смеси на нескольких длинах среднего свободного пробега в ней. Состояние же тяжелого компонента с концентрацией (n_h) и молярной массой (m_h) радикально отличается от легкого, поскольку за все время релаксации легкого компонента тяжелый компонент (в главном приближении по параметру

$\varepsilon = \frac{m_l}{m_h} \ll 1$) остается в замороженном состоянии с «холодной» температурой перед ударным фронтом.

В итоге, на длине релаксации легкого компонента возникает сильно поступательно неравновесное состояние с «горячей» эффективной среднемассовой температурой и с большим отрывом по значениям средних макроскоростей потоков легкого и тяжелого компонентов (порядка величины скорости потока смеси газов, набегающих на фронт скачка). Отрыв по макроскорости у компонентов бинарной смеси является главным фактором, снижающим барьер активированной химической реакции, как впервые было показано аналитически в работе [3], однако при априорном задании исходных молекулярных распределений.

Вообще говоря, ввиду того, что скорости тяжелого и легкого компонентов выравниваются, как известно, на длине в $\frac{1}{\varepsilon}$ раз больше, чем длина релаксации легкого компонента, состояние с сильной поступательной неравновесностью будет сохраняться на значительно большем масштабе внутри фронта ударной волны, чем длина релаксации легкого компонента.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 20-07-00740 А. Исследование выполнено в рамках гранта Президента РФ для молодых учёных – кандидатов наук МК-1330.2020.9.

Литература

1. *Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Черешнев С.Л.* Распределение молекулярных скоростей во фронте ударной волны в газовых смесях // Известия АН СССР, МЖТ, 1990, № 2, с. 144–150.
2. *Кузнецов М.М., Кулешова Ю.Д., Перов А.А., Смотрова Л.В.* Эффект высокоскоростного перехлеста в ударной волне с предельным сжатием // Вестник МГОУ, серия «Физика и математика», 2019, № 3, с. 76–81.
3. *Великодный В.Ю.* О влиянии движения газа на кинетику физико-химических превращений // ЖТФ, 1989, Т. 59, Выпуск 12, с. 126–129.

УДК 533 6.011

Перехлест средней продольной кинетической температуры в ударно сжатой бинарной смеси газов

И.В. Демидов¹, М.М. Кузнецов¹, Ю.Д. Кулешова¹, Д.Ю. Сатюков¹, Смирнова А.С.¹

¹Московский государственный областной университет

Найдено аналитическое представление для максимума средней продольной кинетической температуры \bar{T}_x , где

$$\bar{T}_x = \frac{n_h T_{hx} + n_l T_{lx}}{n_h + n_l} \quad (1)$$

здесь T_{hx} , T_{lx} – продольные кинетические температуры вдоль направления потока по оси «Ох» в ударной волне, n_h и n_l – концентрации соответственно тяжелого и легкого компонентов бинарной смеси, сжимаемой в ударной волне.

Полученный результат является точным, поскольку непосредственно следует из законов сохранения потоков массы отдельных компонентов и потока суммарного импульса для всей смеси газов. Ранее подобный результат, но для простого однокомпонентного газа был получен в работе [1].

Следует отметить, что наличие анизотропии поля кинетических температур в ударной волне, вследствие которой температура вдоль потока T_x не равна температуре T_{\perp} для направления перпендикулярного к нему, долгое время не была достаточно очевидным фактом. Различие значений величин T_x и T_{\perp} наблюдалось и в эксперименте [2]. Однако только после фундаментальной теоретической работы [1] оно стало строгим фактом.

Дискуссия в этом вопросе коснулась также и обычной полной кинетической температуры T , где $T = \frac{1}{3}T_x + \frac{2}{3}T_{\perp}$, максимум которой был обусловлен максимумом температуры T_x и был достаточно слабым в простом однокомпонентном газе. Так в работе [3] утверждалось, что в простом однокомпонентном газе без физико-химических превращений: «нет никаких физических причин», которые могли бы объяснить немонотонный ход изменения температуры внутри фронта ударной волны.

В связи с этим заметим, что физические причины немонотонности изменения температуры те же, что и причины немонотонного изменения удельной энтропии в ударной волне, рассмотренные в монографии [4].

В последующих численных расчетах структуры ударных волн, проведенных численными методами [5], немонотонность как температуры T_x , так и полной температуры T в бинарных смесях получалась регулярно.

Этот эффект, получивший название «перехлеста», возрастает с увеличением концентрации легкого компонента смеси n_l и одновременным уменьшением ее молекулярной массы m_l .

В работе [6] была получена оценка этого эффекта для значений функций распределений пар молекул по их относительным скоростям.

В результате проведенного анализа искомая величина максимальной средней продольной относительной температуры $\bar{\theta}_x$, где $\bar{\theta}_x = \frac{\bar{T}_x}{T_0}$, T_0 – температура потока перед фронтом ударной волны, оказалась равной

$$\bar{\theta}_x = \frac{1}{4} \left(1 + \xi_0 + \gamma_l M_l^2 + \xi_0 \gamma_h M_h^2 \right)^2 \cdot (1 + \xi_0 \xi)^{-1} \left[\gamma_l M_l^2 + \xi_0 \xi^{-1} (\gamma_h M_h^2) \right]^{-1} \quad (2)$$

где $\xi_0 = \frac{n_{h0}}{n_{l0}}$, $\xi = \frac{N_h}{N_l}$, $N_h = \frac{n_h}{n_{h0}}$, $N_l = \frac{n_l}{n_{l0}}$, n_{h0} и n_{l0} – концентрации тяжелого и легкого компонентов перед фронтом волны, γ_l , γ_h – показатели адиабат этих компонентов, а M_l , M_h – их числа Маха перед волной.

Для значений $\xi_0 = \xi = 0$, $\gamma_l = \frac{5}{3}$, соответствующих простому однокомпонентному газу, формула переходит в соответствующую формулу для $\bar{\theta}_x$ из работы [1].

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 20-07-00740 А. Исследование выполнено в рамках гранта Президента РФ для молодых учёных – кандидатов наук МК-1330.2020.9.

Литература

1. *Shee-MangYen*. Temperature overshoot in shock waves, *Physics of Fluids*, vol.9, № 7, 1966, P. 1417–1418
2. *Muntz E. P. and Harnett L. N.* Molecular velocity distribution function measurements in a normal shock wave, *Physics of Fluids*, V. 12, № 10, 1969, P. 2027–2035.
3. *Толбот Л.* Структура ударных волн. *Ракетная техника и космонавтика*, 1962, № 7, с. 3–12.
4. *Зельдович Я.Б. и Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966, 688 с.
5. *Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Черешнев С.Л.* Распределение молекулярных скоростей во фронте ударной волны в газовых смесях // *Известия АН СССР, МЖТ*, 1990, № 2, с. 144–150.
6. *Kuznetsov M.M., Kuleshova Y.D., Perov A.A. and Smotrova L.V.* Hypersonic approximation for distribution function of pairs of molecules in shock wave, 2020, *Journal of Physics Conference Series*, vol.1560, P. 012056.

УДК 548.4

Исследования образования ЦО и устойчивости к ИИ простых и смешанных кристаллов флюорита

С.Э.Саркисов¹, В.А.Юсим^{1,2}, С.М.Голуб¹

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Проблема обеспечения радиационной стойкости оптических материалов актуальна для многочисленных областей техники, например дозиметрии больших доз и интенсивностей ионизирующих излучений (ИИ), для обеспечения долговременной эксплуатации измерительных устройств медицинской техники, мониторинга в таможенной службе, где технические решения основаны, главным образом, на применении сцинтилляторов, набираемых за время эксплуатации дозы до 10^{14} γ -квантов/см². Выращивание фторсодержащих крупногабаритных монокристаллов методом ГНК для получения стойких к воздействию высоких энергий γ квантов и нейтронных потоков материалов, которые можно применять для создания радиационно-стойких оптических систем и/или легких и тяжелых сцинтилляторов в детекторах регистрации ИИ имеет важное прикладное значение.

Целью настоящих исследований являлось изучение возникновения центров окраски (ЦО), образующихся под воздействием γ -облучения в кристаллах со структурой флюорита – простого кристалла CaF₂ с упорядоченной структурой и смешанных кристаллов иттрофлюорита $Ca_{1-x}Y_xF_{2+x}$ (при $x = 0,003; 0,01; 0,05$ и $0,1$) с разупорядоченной структурой, выращенных методом ГНК. В ходе процесса окрашивания в объеме кристалла происходит возникновение структурных дефектов [1–3] из-за нарушения зарядовой нейтральности в кристаллической решетке при изменении стехиометрического состава. В наших исследованиях по радиационному окрашиванию кристаллов проводились путем анализа спектров поглощения образцов в форме пластинок размером 10x10x4 мм, облученных γ -квантами

от источника ^{60}Co мощностью экспозиционных доз 150 и 1000 Грей ($1,5 \cdot 10^4$ и 10^5 Рад). По результатам исследований были сделаны выводы:

1. Объяснены изменения спектрального состава по частотам длин волн полос поглощения ЦО в радиационно-окрашенных кристаллах с упорядоченной и разупорядоченной структурами на основе связи дефектообразования с изменением энергий решеток рассматриваемых кристаллов;

2. Экспериментально показано, что смешанные кристаллы иттрофлюорита обладают значительно большей радиационной стойкостью по сравнению с простыми кристаллами флюорита. Эти данные согласуются с теоретическим предположением, что в кристаллах с большей энергией решетки (CaF_2) сохраняется после облучения больше дефектов, чем в кристаллах со слабой связью ($\text{CaF}_{2-n}\text{YF}_3$) ионов в решетке;

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 20-07-00135, 20-08-00482) и НИЦ Курчатовский институт (приказ № 1919 от 25.09.2020 г.).

Литература

1. Крегер Ф. Химия несовершенных кристаллов; под общ. ред. проф. О.М. Полторака. М.: Мир, 1969. 656 с.
2. King A.D., Moerman J. «Calcium Diffusion in Pure and YF₃ Doped Single Crystal CaF₂» // Phys. stat. sol. 1974, a22, № 2, с. 455–463.
3. Arends J. Color Centers in Additively Colored CaF₂ and BaF₂ // Physica Stat. Solidi. 1964. V. 7, N 3. P. 805–815.

УДК 548.4

Изучение воздействия ИИ и влияния среды термообработки на образование ЦО в кристаллах флюорита и иттрофлюорита

Саркисов С.Э.¹, Клосс Ю.Ю.^{1,2}, Юсим В.А.¹, Сметанин М.Ю.²

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Миграция точечных дефектов, зависящая в т.ч. от структурных особенностей кристаллической решетки, оказывает влияние на радиационную стойкость кристаллов. Для изучения особенностей радиационной стойкости кристаллов, различающихся степенью структурного упорядочения и плотностями кристаллических решеток, исследовалось влияние среды термообработки на образование и разрушение ЦО в γ -облученных кристаллах CaF_2 и $\text{CaF}_{2-n}\text{YF}_3$.

В общей схеме температурных превращений ЦО при отжиге кристаллов вначале происходит распад центров с последующим объединением (обычно, при T до $500\text{--}700^\circ\text{C}$), в более сложные ассоциаты. В радиационно-окрашенном кристалле, одновременно с подобной схемой происходит перераспределение электронов с дырочными V_k -центрами, что приводит к обесцвечиванию кристалла. Измерения спектров поглощения образцов в виде пластинок размером $10 \times 10 \times 4$ мм производились через 2 часа после окончания облучения γ -квантами при комнатной температуре (источник ^{60}Co с мощностью экспозиционной дозы 150, 900, 1000 и 2750 Грей (порядка и выше 10^5 Рад). Время экспозиции для отдельных образцов в зависимости от наводимого окрашивания составляло 10 и 30 мин. По результатам спектральных исследований влияния предварительного отжига при температуре 1400 К кристаллов, в различных газовых средах вакуума и азота на возникновение ЦО при γ -облучении сделано заключение о способах увеличения радиационной стойкости кристаллов со структурой флюорита. Особого интереса заслуживает влияние отжига в азоте на увеличение радиационной стойкости кристаллов по мере увеличения степени их структурного разупорядочения. Подобный эффект может объясняться химической природой азота, который проявляет многочисленные степени окисления, отдавая до 5 внешних электронов, нейтрализующих F-анионные вакансии (с которыми связано образование ЦО) и в определенной степени близостью атомных радиусов F(0,71А) и N(0,73А). Механизм такого поведения следует связывать с протеканием многостадийного процесса: 1-Адсорбцией азота поверхностью отжигаемого образца, связанной с притяжением силами Ван-дер-Ваальса; 2-Последующим радиационным облучением образца; 3-Ионизацией адсорбированных атомов азота с образованием электронов; 4-Захватом электрона анионной вакансией и ее нейтрализацией. В общем случае, причина адсорбции связана с нескомпенсированностью молекулярных сил вблизи поверхности кристалла, т.е. наличием адсорбционного силового поля [1, 2] на величину которого должна оказывать влияние плотность кристаллической решетки. Чем более «рыхлая» решетка, тем должна быть выше нескомпенсированность молекулярных сил вблизи поверхности кристалла. В результате 2-х стадийного процесса ионизации атома

азота (при излучении с $\lambda=85,3$ нм – рентгеновское излучение): $N^0 \rightarrow N^+ + e^-$ и захвата электрона F-анионной вакансией $[q]^+ : [q]^+ + e^- \rightarrow [q]^0$, происходит ее зарядовая компенсация и нейтрализация, что предотвращает участие вакансии в образовании. Исследования показали, что кристаллы CaF_2 и $\text{CaF}_2\text{-}n\text{YF}_3$ ($n = 1, 5$ и 10 моль%) отожженные в азотной атмосфере, оптически устойчивы по отношению к ионизирующему γ -облучению.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 20-08-00347, 20-08-00698 20-08-00235) и НИЦ Курчатовский институт (приказ № 1919 от 25.09.2020 г.).

Литература

1. В.А. Киреев. Краткий курс физической химии. М.: Химия, 1978, с. 624.
2. Х.С. Багдасаров. Высокотемпературная кристаллизация из расплава. М.: Физматлит, 2004, с.159.

УДК 54.061

Численное моделирование состояний тепловой системы в процессе синтеза монокристаллов фторидов метода ГНК с использованием различных ростовых тиглей

В.А. Юсим^{1,2}, С.Э. Саркисов², Д.О. Михайлов^{1,2}, Р.К. Калимуллин², Ф.А. Юсим²

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Целью настоящей работы являлось сравнение значений состояния тепловой системы в процессе синтеза монокристаллов, полученных при перемещениях исследуемых ростовых тиглей различных форм и размеров относительно их начального положения в кристаллизационной установке.

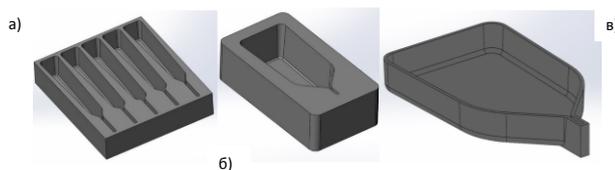


Рис. 1. Графитовые тигли (а–б) в виде изложниц и (в) в виде лодочки: а – основной графитовый тигель, позволяющий получить монокристаллы размерами 150мм x 25мм x 30мм (без затравки) с устьем 60°, 90°, 120; б – графитовый тигель, позволяющий получить монокристалл размерами 110мм x 60мм x 50мм (без затравки); в – графитовый тигель, позволяющий получить крупногабаритный монокристалл размерами 300мм x 198мм x 40мм (без затравки)

В качестве расчетных моделей были выбраны три типа ростовых тиглей применяемые нами для синтеза монокристаллов фторидов (рис. 1) помещенные в кристаллизационную установку «Рубитек-1» с тепловым узлом [1, 2]. В качестве объекта исследования использовался монокристалл со структурой флюорита CaF_2 .

Сравнения состояний тепловой системы проводилось путем перемещения отдельно каждого исследуемого графитового тигля с монокристаллом внутри ростового узла (относительно нагревателей, диафрагм) с шагом 5мм с позиции начала кристаллизации до позиции конца кристаллизации [2–4]. Таким образом, исследовалось влияние температурного поля тепловой системы для каждого смещения на форму фронта роста монокристалла и температурного распределения в нем. Механизм переноса тепла в данной системе осуществлялся с помощью механизмов молекулярной теплопроводности и радиации (радиационно – кондуктивный теплообмен). Исследуемый объект (монокристалл CaF_2) находился в состоянии конвективного теплообмена со средой в тепловом узле и лучистого теплообмена с окружающими его поверхностями. Численное моделирование состояний тепловой системы производилось по методике расчета сопряженного теплопереноса с использованием CFD-кода в программе SolidWorks Premium с использованием пакета Flow Simulation.

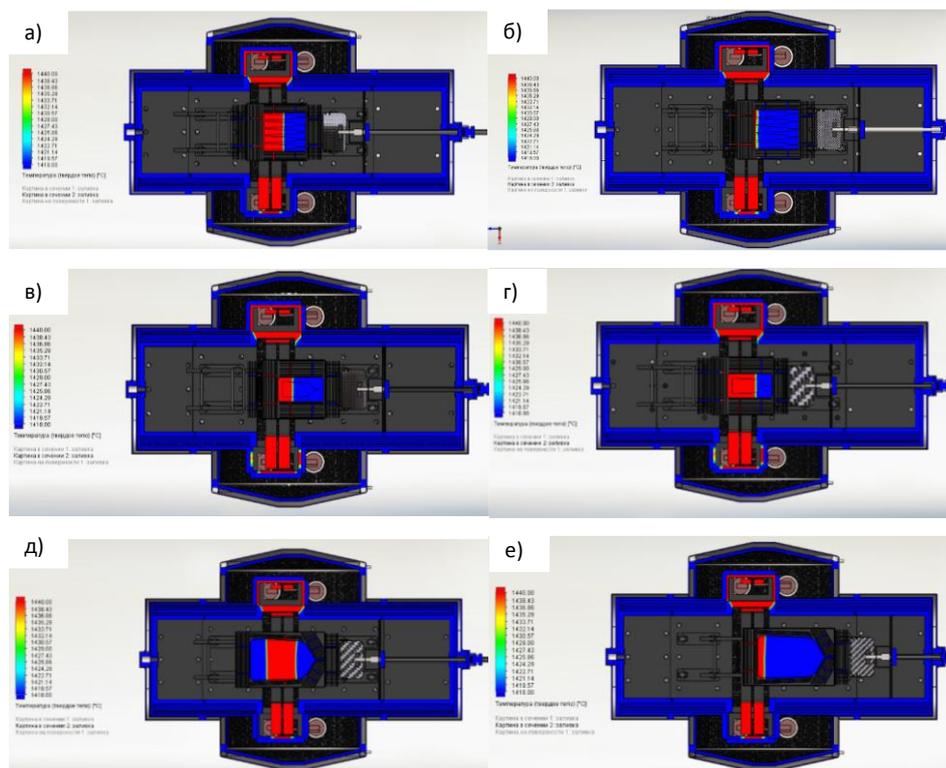


Рис. 2. Результаты математического моделирования распределения температуры вдоль ростового узла кристаллизационного аппарата «Рубитек - 1» в начале и конце кристаллизации: а, б – основной графитовый тигель, позволяющий получить монокристаллы размерами 150мм x 25мм x 30мм (без затравки) с устьем 60°,90°,120; в, г – графитовый тигель, позволяющий получить монокристалл размерами 110мм x 60мм x 50мм (без затравки); д, е – графитовый тигель, позволяющий получить крупногабаритный монокристалл размерами 300мм x 198мм x 40мм (без затравки)

Результаты численного моделирования позволили определить температурные распределения в тепловой системе для каждого смещения графитового тигля с монокристаллом. Также в результате расчета были получены значения превышения скорости кристаллизации над скоростью перемещения тигля. В целом, анализируя рис. 2 (а–е) был сделан вывод что наиболее благоприятные условия тепловой системы для синтеза монокристалла CaF_2 получены с применением ростового графитового тигля позволяющий выращивать крупногабаритные монокристаллы размерами 300мм x 198мм x 40мм (рис. 1в). Благодаря конструкции данного тигля превышение скорости кристаллизации над скоростью перемещения тигля оставалось незначительным по сравнению с тиглями, изображенными на рис. 1 (а) и (б), также применение данного тигля обеспечивало слегка выпуклую изотерму фронта роста и благодаря раздельному управлению нагревателей по мощности, формировало нужный угол наклона вертикального градиента. Из чего следует, что для используемой тепловой системой рационально применять тигель, изображенный на рис. 1 (в), который позволяет получать наиболее оптимальные тепловые условия и выращивать оптически совершенные монокристаллы фторидов [3, 4].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 20-08-00634, 20-08-00278, 20-08-00211) и НИЦ Курчатовский институт (приказ № 1919 от 25.09.2020 г.).

Литература

1. V. A. Yusim, S. E. Sarkisov, V. V. Ryabchenkov, Yu. Yu. Kloss, I. V. Govorun, L. V. Ivanova, A. V. Sakmarov «Mathematical modeling of heat and mass transfer processes in the graphite thermal unit of the crystallization apparatus for Horizontal directional solidification method» Published 1 June 2020, Journal of Physics: Conference Series, V. 1560, International Interdisciplinary Scientific Conference «Advanced Element Base of Micro- and Nano-Electronics» 2020 20–23 April 2020, Moscow, Russian Federation, 13 pages.
2. Юсим В.А., Калимуллин Р.К., Рябченко В.В., Саркисов С.Э., «Тепловой узел установки для выращивания галогидных кристаллов методом горизонтально направленной кристаллизации» Патент РФ № 2643980, 06 февраля 2018 г.
3. Багдасаров Х.С. Горяинов Л.А. Тепло- и массоперенос при выращивании монокристаллов направленной кристаллизацией. Физматлит, 2007. 224с. ISBN 978-5-9221-0806-5.
4. Багдасаров Х.С. Высокотемпературная кристаллизация из расплава. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. 160с. ISBN 978-5-9221-0482-9.

Simulation of the neutron sources in a gneiss tunnel

Ю.М. Гаврилюк, А.М. Гангануев, А.М. Гежаев, В.В. Казалов, С.П. Якименко

As is well known the neutron background plays an important role in low-background physics research as well as other elementary particle physics researches.

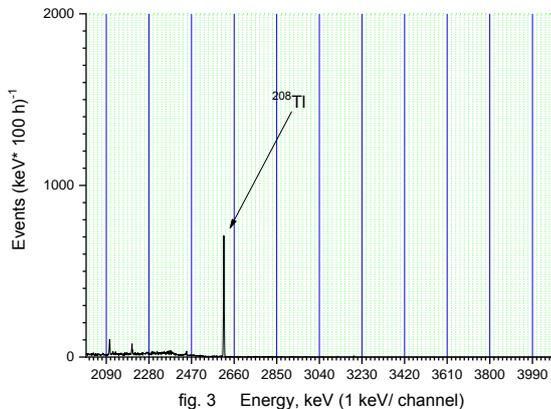
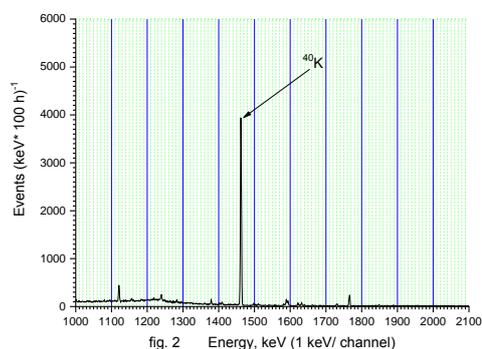
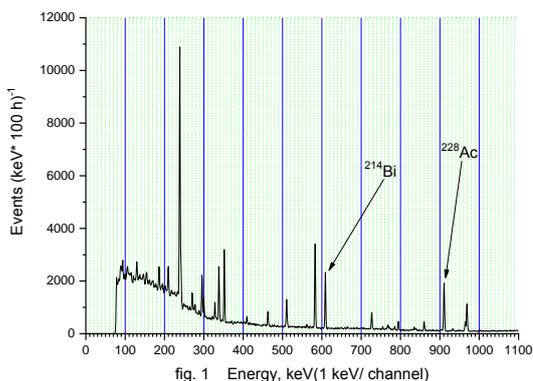
In the Baksan Neutrino Observatory to cut off the background by cosmic rays, the main equipment is placed in a tunnel that was mined in agneiss massif. As a result, the main source of background is the natural decay of radionuclides that contained in gneiss.

In this paper the Geant4 software package was used to simulate the main sources of the neutron background.

Base for simulating

At the first stage, the activity of parent radionuclides in gneiss was measured at 19.12.2014.

The following spectrums of the gamma-activity of radionuclides were obtained:



Here on figures 1, 2, and 3 one can see gamma-spectrum of a gneiss sample. Results of spectrum handling is demonstrated in the table 1, here the recording effectivity was obtained by simulation with Geant4 of electromagnetic physicslistpacket.

Therefore following values of the activity of radionuclides were obtained $^{238}\text{U} - 12.6 \text{ Bq/kg}$, $^{232}\text{Th} - 29.2 \text{ Bq/kg}$. Taking into account the gneiss density we have $^{238}\text{U} - 3.28 \cdot 10^4 \text{ Bq/m}^3$, $^{232}\text{Th} - 7.59 \cdot 10^4 \text{ Bq/m}^3$.

Table 1

Isotope	Line energy (keV)	Registration effectivity (%)	window (keV)	Count rate in the window, (without of bed) (hour ⁻¹)	Semiconductor detector back-ground (without of bed) (hour ⁻¹)	Activity (without of detector background) (Bq/kg)
^{40}K	1460.8	0.81	± 5	138	$2.3 \cdot 10^{-2}$	282 ± 2
^{208}Tl	2614.5	0.47	± 6	28,6	$1.1 \cdot 10^{-2}$	10.9 ± 2.0
^{214}Bi	609.3	1.61	± 4	53,0	$2.2 \cdot 10^{-2}$	12.6 ± 0.2
^{228}Ac	911.2	1.18	± 4	52,4	$1.2 \cdot 10^{-2}$	29.2 ± 0.4

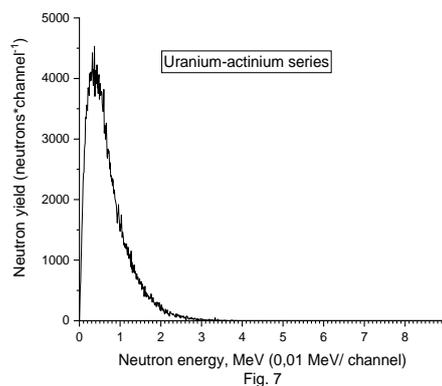
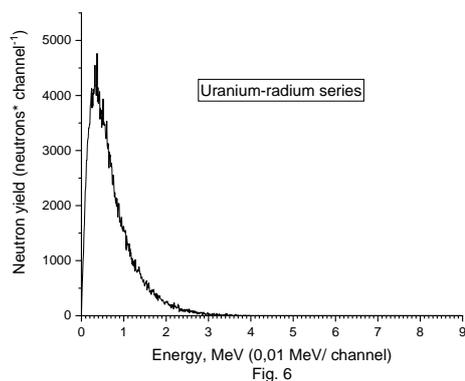
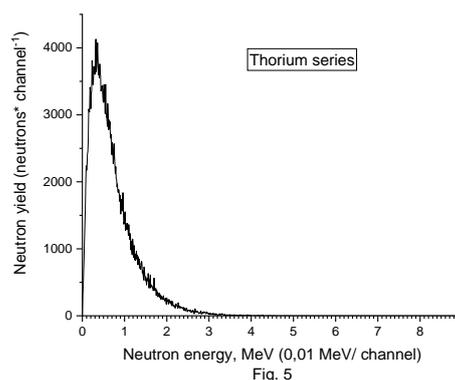
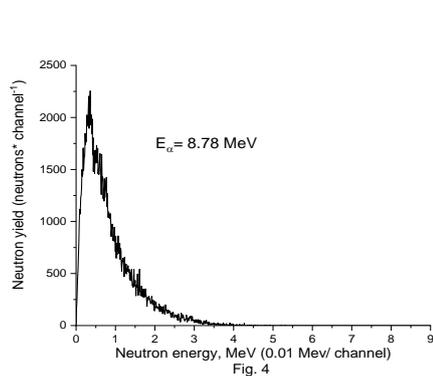
There was no direct measurement of the tunnel gneiss chemical composition for time of writing this article, so the chemical composition of the nearest point of the mountain Dykh-su was taken on site [4] (see table 2)

Table 2. Chemical composition (%)

SiO ₂	TiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	FeO	MnO	MgO	CaO	Na ₂ O	K ₂ O	H ₂ O	P ₂ O ₅
69.343	0	15.438	1.396	1.17	0	1.177	2.763	4.278	3.969	0.419	0

Firstly, the neutron output spectra from α -particles of certain energies were played out. It was used physicslist of QBBC. Thus for example, Fig. 4 shows the neutron spectrum from an α -particle with an energy of 8.78 MeV from the decay of ²¹²Po. So, the neutron yield was $1.9 \cdot 10^{-5}$ per decay. It was a billion of initial events for every alpha-particle energy. Fig. 5 shows the summarized spectrum of the thorium series at 1 billion decays of the parent nuclei for the case of dynamic isotope equilibrium. Fig. 6 shows a similar uranium-radium series, and Figure 7 also shows a similar uranium-actinium series. At the same time, in all these series, neutrons were obtained with an energy of at least 10 keV.

Then, by summing up with taking into account the statistical weight and activities of the maternal nuclides, the total spectrum was calculated in Fig. 8. This spectrum will be used for statistical sampling of the initial neutrons in gneiss. The total number of neutrons in Fig. 8 is 38.6, it is the yield of neutrons per m³ of gneiss.



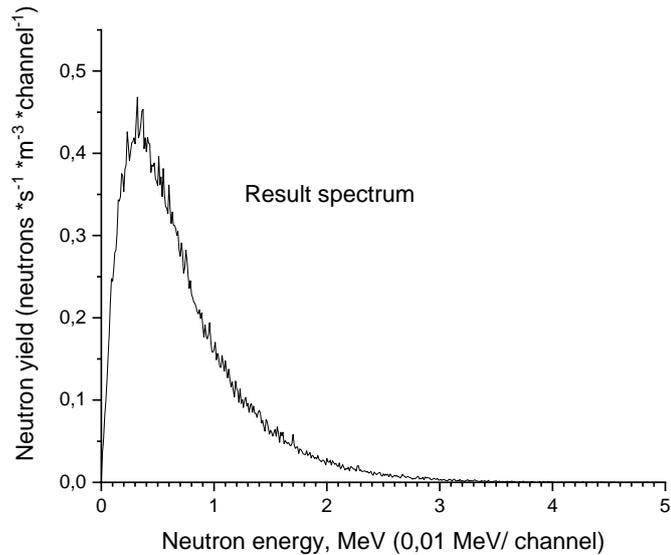


Fig. 8

The gneiss tube simulation

According to [3] the length of the camera is 40 m, its radius is 3 m. For the best statistics in this work all calculations were carried out for an exposure of 10 minutes. Thus a gneisstube with an internal radius of 3 m and a length of 40 m is used in the calculations.

Since the neutron yield is of the degree of 10^{-4} the drawing of α -particles with subsequent neutron generation is impractical due to the huge waste of machine time in vain. Therefore, we have to play out the spectrum of initial neutrons based on Fig. 8. At the same time, if about 20 million events are needed to draw the initial neutrons in a gneisstube with a thickness of 1 m, then 40 billion events will already be required to draw the initial α -particles in the same tube.

Here was used using physicslist of QGSP_BERT_HP, one can see [10]. At the first stage of the simulation, the neutron flux at the boundary of the gneiss wall and the air cavity was calculated. To better avoiding the edge effects, neutron emanating from gneiss in the selected central part of the tube with a length of 10 m were taken into account which corresponds to the surface area of the selected zone of 188.5 m^2 .

First, a trial simulation was performed with an external radius of a gneisstube of 4 m, which corresponds to a gneiss volume of 879.6 m^3 , taking into account also the neutron yield of 38.6 and the exposure time of 600 seconds, the number of events for the calculation is ~ 20 million as mentioned above. The neutrons coming out of the gneisstube into the allocated 10-meter part of the air cylinder had the energy value checked then the event was stopped and killed. For neutrons released in other parts of the air cylinder, the event simply stops and is killed. The simulation results are presented in 3 graphs fig. 9–11.

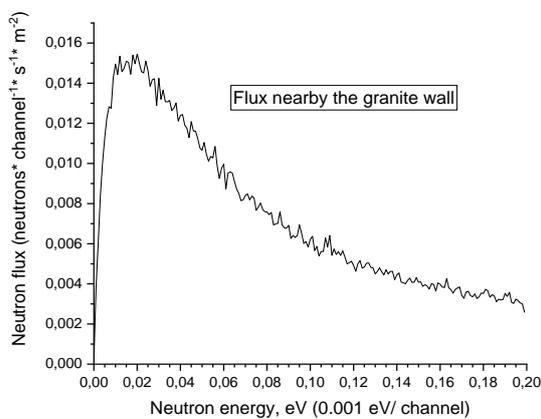
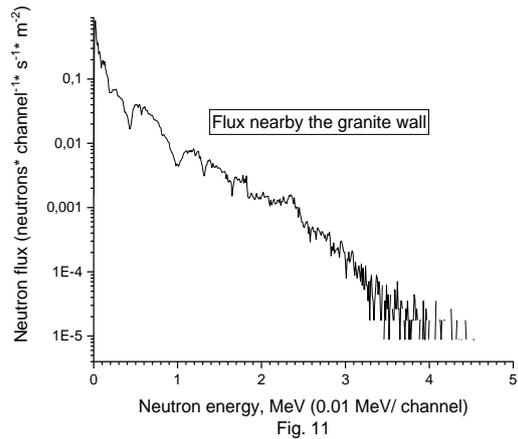
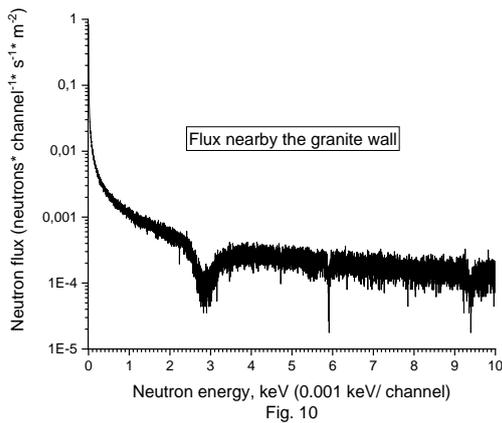


Fig. 9

Let's call these graphs as follows: Fig. 9 is a graph of low energy neutrons, Fig. 10 is intermediate energy and Fig. 11 is high energy neutron graph. Total neutron fluxes are, for low energies is $1.47 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$, for thermal neutrons (of 0.025 eV) is $1.5 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$, for intermediate energies is $9.84 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$ and for high energies is $7.74 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$.



When switching to modeling with an external radius of a gneisstube to 5 m, it turned out that for intermediate and high energies, the total neutron fluxes remained almost the same, and for small energies, the total flux became to $1.64 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$ and for thermal neutrons $1.61 * 10^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$. Since at this radius of a gneisstube the thermal neutron flux is slightly larger, it was decided to perform further simulating with tube of $5 \text{ m} \leq R \leq 3 \text{ m}$ and $l = 40 \text{ m}$.

At the second stage of the simulation, an orb of the same air with a radius of 0.5 m, i.e. with a surface area of $\pi \text{ m}^2$ was allotted in the center of the air cavity. For neutrons with an energy of $< 0.2 \text{ eV}$ the energy value was checked then the event was stopped and killed. High-energy neutrons passed through this ball without fixing the energy and forcibly stopping and destroying the event.

As a result, it was obtained for dry air (Fig. 12) the low-energy neutron flux is $5.85 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$, the neutron flux of energy of 0.025 eV is $6.1 * 10^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$, the neutron flux of energy of 0.024 eV is $6.1 * 10^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$ and the neutron flux of energy of 0.026 eV is $5.9 * 10^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$.

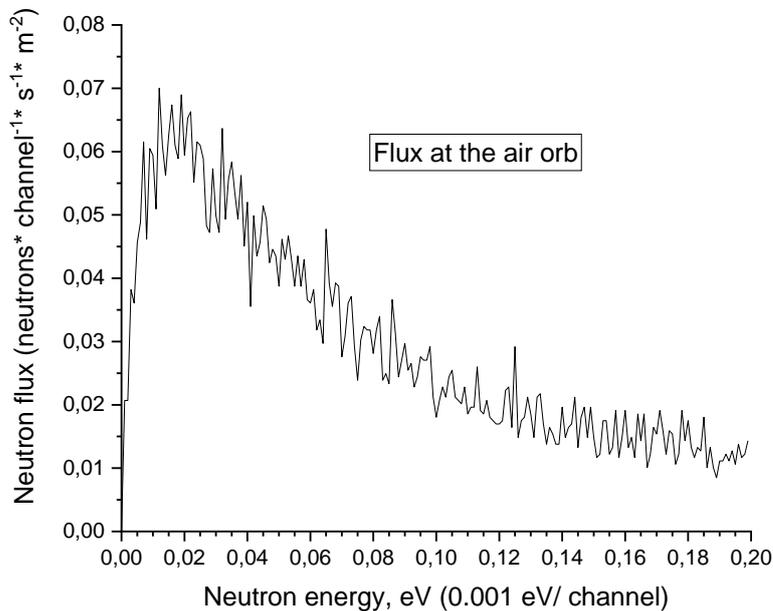


Fig. 12

During further modeling, the shape of the spectrum for low energies did not change.

At simulating with moist air (59.7%), the low-energy neutron flux became $6.0 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$, the neutron flux with an energy of 0.025 eV became $6.8 * 10^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$, the neutron flux with an energy of 0.024 eV became $5.6 * 10^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$ and the neutron flux with an energy of 0.026 eV became $6.4 * 10^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$.

Then to simulate water located in rock clefts of unknown configuration but flowing into the tunnel a water insert was introduced, having the shape of a tube and a length the same as a gneisstube and with an external radius of 3 m and a variable internal one. At the same time, the air remained moist. The results one can see in the table 3, where $\Phi_{(E)}$ is neutron flux of energy E and d is the thickness of water tube.

Table 3

d	$\Phi_{(E)}$		
	$\Phi_{(0.024 \text{ eV})}$	$\Phi_{(0.025 \text{ eV})}$	$\Phi_{(0.026 \text{ eV})}$
1 mm	$9.2 * 10^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$	$8.4 * 10^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$	$8.7 * 10^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$
5 mm	$1.5 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$	$1.4 * 10^{-1} \text{ s}^{-1}$	$1.6 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$
1 cm	$1.8 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$	$1.8 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$	$1.9 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$
1.3 cm	$2.0 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$	$2.0 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$	$2.1 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$
2 cm	$2.2 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$	$2.0 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$	$2.0 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$
2.5 cm	$2.0 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$	$2.0 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$	$2.0 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$
3 cm	$2.1 * 10^{-1} \text{ s}^{-1}$	$2.0 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$	$2.2 * 10^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$

Reasoning the result

The neutron energy of 0.025 eV corresponds to room temperature, and let σ_1 be the absorption cross-section for neutrons of energy of 0.025 eV. About such energies, the cross-section is directly proportional to the de Broglie wavelength[9] or inversely proportional to the neutron momentum. Let $\sigma_2 = \sigma_1/e$, where e is the natural logarithm base. Then the energy that corresponds to σ_2 is equal to $0.025 * e^2 = 0.185$ eV. And let $\sigma_3 = \sigma_1 * e$, from which the energy that corresponds to σ_3 is equal to $0.025/e^2 = 0.001$ eV. Let us now introduce the integral coefficient of thermal neutron flux Y , which is equal to the sum of neutron fluxes with energies from 0.001 eV to 0.185 eV.

Then in an orb with a radius of 0.5 m we have:

In dry air without a water insert $Y = 5.6 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$. In humid air without a water insert, $Y = 5.8 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$. The results in humid air with water insert one can see in the table 4. Where Y is the integral coefficient of thermal neutron flux, d is the thickness of water tube.

Table 4

d	Y
1 mm	$7.5 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$
5 mm	$11.3 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$
1 cm	$13.7 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$
1.3 cm	$14.4 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$
2 cm	$15.0 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$
2.5 cm	$14.8 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$
3 cm	$14.5 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$

One here can notice that the Y coefficient increases slightly during the transition from dry to wet air. Then, with the introduction of a water insert, you can notice a significant monotonous increase of the Y coefficient to about $15.0 \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$ with a water insert thickness of 2 cm, and then, with a further increase in the thickness of the insert, Y begins to decrease. One can see that the process of neutron absorption [11] by hydrogen begins to affect.

Conclusion

From this work, it can be concluded that if thermal neutrons are not formed initially at the α -n reaction, then thermalization occurs during the passage of neutrons through the substance. With the introduction of moist air, the thermalization increases slightly, due to the interaction with the hydrogen atoms contained in the moist air. When a water layer is added the number of thermalized neutrons increases more, then at about a layer thickness of 2 cm it reaches the maximum. Then with a further increase in the thickness of the water layer the number of thermalized neutrons becomes smaller due to their increasing absorption. From which it follows that the main part of neutrons occurs in the gneiss thickness where there is a slight thermalization. The main thermalization occurs due to the water located in rock clefts. Variations of the water thickness can bring thermal neutron variations [2, 5, 6].

References

1. Geant4 user documentation, http://www.geant4.org/geant4/cern.ch/support/user_documentation.html
2. *Alekseenko V. V. et al.* Results of measurement of an environment neutron background at BNO INR RAS objects with the helium proportional counter arXiv:1510.05109v2
3. *Ratkevich S.S. et al.* Working characteristics of the New Low-Background Laboratory (DULB-4900, Baksan Neutrino Observatory) arXiv:1204.6424
4. Chemical composition of the mountain Dykh-suht <http://www.servicestone.ru/primenenie-granita.php>
5. *Alekseenko V. V. et al.* The Study of the Thermal Neutron Flux in the Deep Underground Laboratory DULB-4900 ISSN 1063-7796. Physics of Particles and Nuclei, 2017. V. 48, N I, P. 34-37. © Pleiades Publishing, Ltd., 2017
6. *Alekseenko V. V. et al.* Tidal effect in the random-due neutron flux from the Earth's crust, J. Phys.: Conf. Ser. 203, 012045 (2010)/

7. Kudriavtsev V. A. et al. Neutron- and muon-induced background in underground physics experiments arXiv:0802.3566v1
8. Kudriavtsev V. A. et al. Neutron production in (α, n) reactions, Nuclear Inst. And Methods in Physics Research, A 972 (2020) 164095
9. Ishkhanov B.S., Kapitonov I.M., Yudin N.P. Particles and atomic nuclei Moscow University publishing 2013
10. Stewart L. Hydrogen Scattering Cross Section, $^1\text{H}(n,n)^1\text{H}$ LA-7899-MS, Informal Report
11. Belanova T.S. et al. Neutron Radiative Capture Handbook Moscow, Energoatomizdat, 1986

УДК 519.876.5

Моделирование истечения газа через отверстие с круглым сечением

Е.О Комаров¹, Ю.Ю. Клосс^{1,2}, Ф.Г. Черемисин^{1,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

³НИЦ «Информатики и Управления» (Вычислительный Центр РАН им А.А. Дородницына)

В данной работе предлагается метод численного моделирования отражения газа от поверхностей неправильной формы.

При численном решении уравнения Больцмана [1] в каждой ячейке вблизи отражающей поверхности строится касательная плоскость и нормаль к этой плоскости. Объединение этих плоскостей образуют поверхность, которая будет рассматриваться как отражающая при численном решении. Нормаль будет определять направление отражения.

Эффективность этого метода демонстрируется на примере численного моделирования истечения газа через отверстие с круглым сечением. В работе было показано, что данная схема является консервативной, и корректно моделирует круглое отверстие. Проверено, что отражающая поверхность не пропускает частицы.

Моделирование проводилось на примере газа, который истекает из резервуара в вакуум. Начальные условия – однородно распределенный газ в области внутри резервуара и вакуум во всей остальной области счета. Диффузное г.у. – на стенках резервуара, нулевое – на остальных границах.

Вычисления производились с помощью численного решения уравнения Больцмана консервативными методами [2, 3]. Точность решения определялась использованием TVD-схемы второго порядка [4]. Взаимодействие молекул с разными скоростями учитывалось с помощью библиотеки интеграла столкновений [5, 6].

Для решения поставленной задачи было использовано приложение, разрабатываемое в ряде предыдущих работ [7]. С его помощью легко задаются произвольные начальные и граничные условия, однако, только на прямоугольной сетке. Для аппроксимации поверхностей неправильной формы оно было существенно доработано.

Моделирование эволюции функции распределения позволило проследить эволюцию концентрации, представленную ниже для разных размеров отверстия.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 19-29-02018) и НИЦ Курчатовский институт (приказ № 1919 от 25.09.2020 г.).

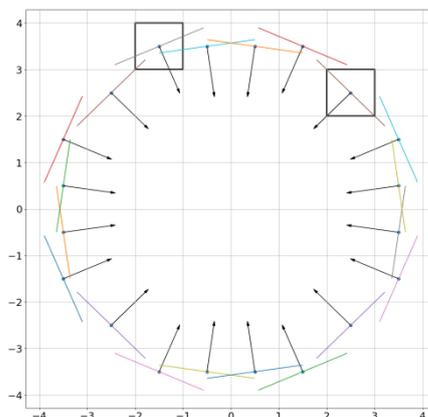


Рис. 1. Схема аппроксимации круглого отверстия

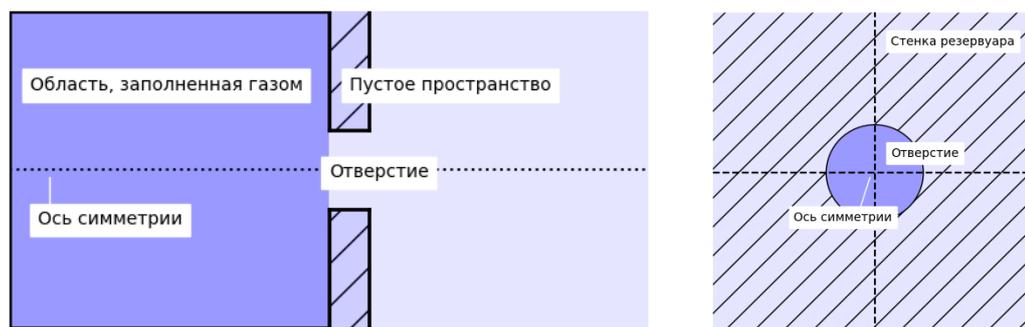


Рис. 2. Схема установки в модельной задаче

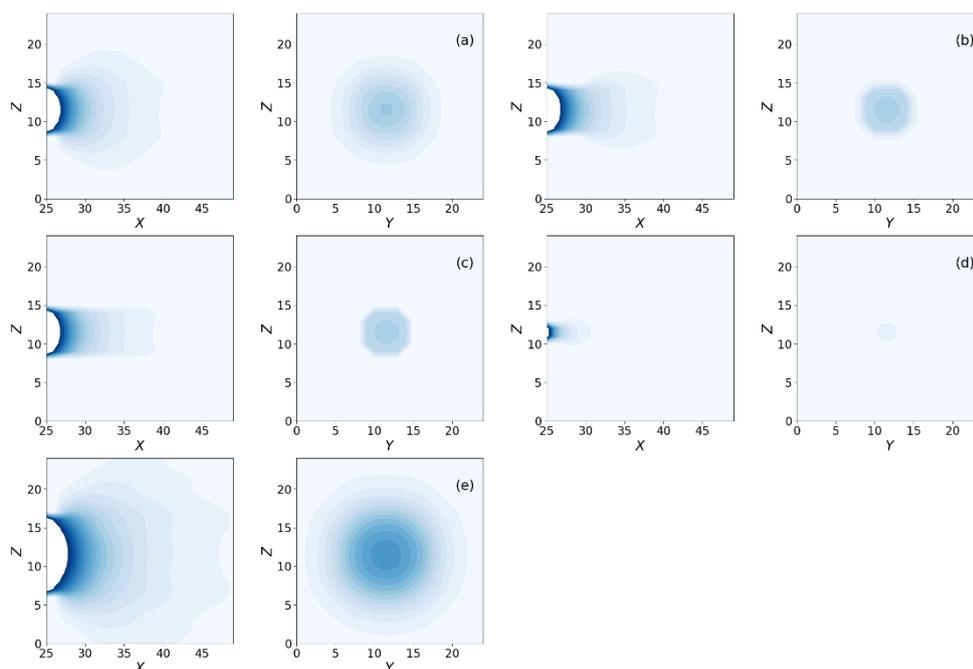


Рис. 3. Распределения концентрации для стационарного течения. Полученные результаты свидетельствуют о том, что данный метод аппроксимации поверхностей неправильной формы может использоваться для решения задач по газовому моделированию. Возможность практического применения метода подтверждается на примере модельной задачи

Литература

1. Коган М. Н., Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
2. Черемисин Ф.Г. Численное решение кинетического уравнения Больцмана для одномерных стационарных движений газа. ЖВМ и МФ. 1970, Т. 10, 3, стр. 654–665.
3. Аристов В.В., Черемисин Ф.Г. Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана // Докл. АН СССР. 1976. Т. 231, № 1. С. 49–52 (про разделение на интеграл и УБ).
4. Самарский А.А., Вабичевич П.Н. Аддитивные схемы для задач математической физики. М.: Наука, 2001. 319 с.
5. Черемисин Ф.Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана. Доклады РАН. 1997, Т. 357, 1, стр. 53–56.
6. Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Черемисин Ф.Г., Рябченков В.В. Система программных модулей для вычисления интеграла столкновений Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2011. Т. 12. С. 40–47.
7. Kotarov E.O., Kloss Yu.Yu., Tcheremissine F.G. 2020 Simulation and analysis of physical characteristics of a molecular beam in a collimator using methods of kinetic theory // Journal of Physics: Conference Series 1560 (2020) 012062. DOI:10.1088/1742-6596/1560/1/012062.
8. Suchard M.A., Wang Q., Chan C., Frelinger J., Cron A., West M., Understanding GPU Programming for Statistical Computation: Studies in Massively Parallel Massive Mixtures. Journal of Computational & Graphical Statistics (JCGS), V. 19, P. 419–438, 2010.

Компьютерное моделирование разделения смеси газов на основе многотрубчатого микронасоса Кнудсена

И.В. Говорун^{1,2}, Т.А. Сазыкина², Ю.В. Широковская²

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В газокINETической теории для расчета течения газа часто используется уравнение Больцмана, которое может быть представлено в следующем виде:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{P^i}{m^i} \frac{\partial f_i}{\partial x} = \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} (f_j' f_i' - f_j f_i) g_{ij} b db d\epsilon d p_j$$

где $f_i = f(t, x, p_i)$, $f_j = f(t, x, p_j)$, $f_j' = f(t, x, p_j')$, $f_i' = f(t, x, p_i')$ – функции распределения газов; t – время; P – импульс молекул; m – масса частиц; g – относительная скорость при столкновении; b, ϵ – параметры столкновения; p_i, p_j, p_j', p_i' – импульсы частиц до и после столкновения. Левая часть уравнения описывает движение частиц, левая часть. Правая часть уравнения Больцмана называется интегралом столкновений, который определяет скорость изменения функции распределения частиц, обусловленных их столкновениями. Интеграл столкновений в правой части считается для потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса:

$$U(r) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right),$$

где параметры σ и ϵ определяются экспериментально и приведены. Метод вычисления интеграла столкновений для простого газа и смеси газов использует кубатурные сетки Коробова.

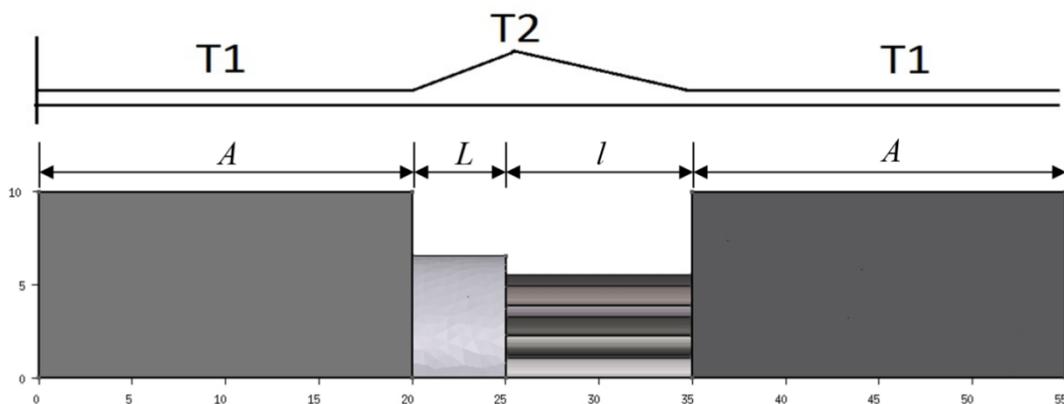


Рис. 1. Продольный вид установки с заданным на поверхностях распределением температуры

График температуры стенок представлен на рис. 1. Серые части установки – резервуары с газом, красная часть – цилиндрическая трубка, на стенках которой поддерживается температурный градиент, синяя – несколько тонких трубок, стенки также с температурным градиентом. Отношение $\frac{T_2}{T_1} = 1,3$. Моделируется периодическая система из микронасосов, но периодические граничные условия позволяют свести задачу к моделированию четверти одного микронасоса.

Разбиение модели на неструктурированную сетку производится с помощью программного пакета GMSH.

На рис. 2 показана сетка всей установки. Градиент цвета от синего к красному показывает температуру газа.

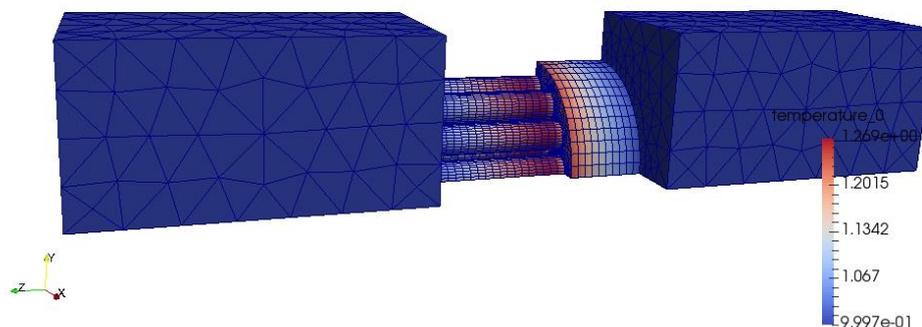


Рис. 2. Общий вид пространственной сетки в призматическо-тетраэдрической пространственной дискретизации. В качестве примера рассмотрим разделение смеси газов атомов трития (газ 0, m (масса атома) = 1, d (диаметр атома) = 1, n (начальная концентрация) = 1/11) и газа атомов дейтерия (m (масса атома) = 0.666667, d (диаметр атома) = 0.87358, n (начальная концентрация) = 10/11), шаг по времени 0.00237945

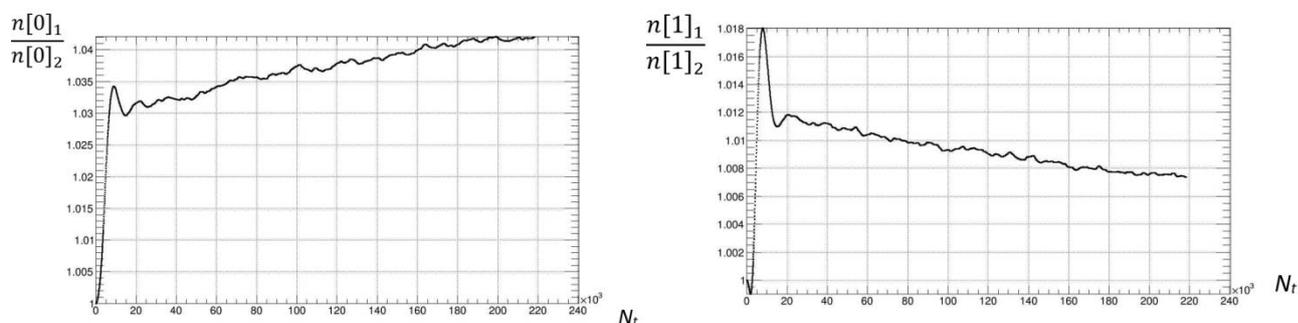


Рис. 3. Изменение отношения концентрации трития и дейтерия в резервуарах в зависимости от времени (временных шагов)

Из графиков следует, что применение многотрубчатого микронасоса Кнудсена возможно для разделения смесей газов – отношение концентраций газов различно в один и тот же момент времени.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 20-08-00634, 20-08-00278) и НИЦ Курчатовский институт (приказ № 1919 от 25.09.2020 г.).

Литература

1. Коган М.Н. Динамика разреженного газа (кинетическая теория). М.: Наука, 1967. 440 с.
2. Гаспарян М.М. Солвер для решения уравнения Больцмана на неструктурированных сетках и его применение для изучения многотрубчатого микронасоса Кнудсена М.: МФТИ, 2018.
3. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Издательство иностранной литературы, 1961.
4. Черемисин Ф.Г. Введение в консервативный проекционный метод вычисления интеграла столкновений и метод решения уравнения Больцмана М.: МФТИ, 2015. 80 с.
5. Додулад О.И. Разработка многоточечных проекционных методов вычисления интеграла столкновений Больцмана и их алгоритмической и программной реализации М.: МФТИ, 2015.

Разработка вычислительных алгоритмов и программных солверов для анализа свободномолекулярного течения газа

Юсим В.А.^{1,2}, Широковская Ю.В.², Сакмаров А.В.²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Национальный исследовательский центр Курчатовский институт

Течение разреженного газа через трубы является одной из важных прикладных задач динамики разреженного газа. Первые исследования в этой области были выполнены Кнудсенем, Смолуховским и Клаузингом в период 1910–1930 гг. [1].

В механике сплошной среды перетекание газа по соединяющему сосуды каналу приводит к установлению в них равенства давлений. Кнудсенем было показано экспериментально, что для свободномолекулярного течения через отверстие это условие не выполняется [2]. Свободно молекулярное течение через длинные каналы рассматривалось Смолуховским [3] и Клаузингом [4]. В предположении, что молекулы газа отражаются от стенок канала по закону косинусов, Клаузингом было выведено интегральное уравнение, описывающее такое течение [5]. Однако отражение по закону косинусов является не естественным. Использование общепринятого зеркально-диффузного отражения требует проведения численного моделирования. Постановка задачи показана на рис. 1. Сосуды считаем большими, так что молекулы не изменяют состояния газа в сосудах, проникнув из одного сосуда в другой.

Течение определяется двумя безразмерными параметрами подобия, $r=L/D$ и $s=T_2/T_1$, а также коэффициентом аккомодации α . Мы зафиксируем параметр $s=2$ и рассмотрим влияние параметров r и α .

В начальный момент функция распределения по скоростям газа внутри системы имеет максвелловский вид при температуре T_j и числовой плотности молекул n_j в сосуде $j(j=1,2)$, в трубке температура меняется линейно от T_1 до T_2 :

$$f(\xi_x, \xi_y, \xi_z) = n_j \sqrt{\left(\frac{m}{2\pi k T_j}\right)^3} \exp\left(-\frac{m(\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)}{2k T_j}\right)$$

где ξ_x, ξ_y, ξ_z – проекции скорости молекулы на координатные оси, m – масса молекулы газа, k – постоянная Больцмана.

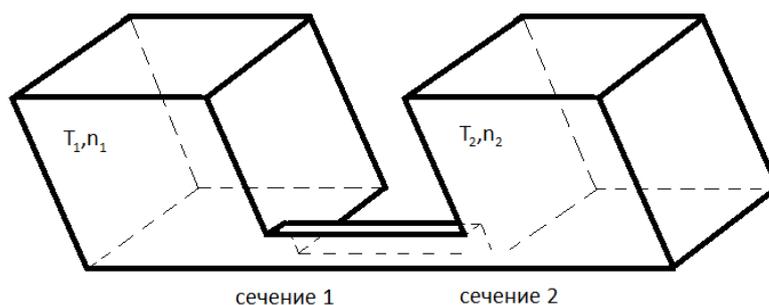


Рис. 1. Схема задачи: 2 сосуда разделены короткой трубкой, ширина ($2D$) которой много меньше длины свободного пробега молекул в обоих сосудах. Длина трубки L . В каждом сосуде газ находится в равновесии при температурах T_1 и T_2 , ($T_1=2 T_2$) и концентрации n_1 и n_2 , ($n_2=2 n_1$). Давления в правом и левом сосудах в начальный момент равны

Отражение молекул от стенок резервуаров и трубки является зеркально-диффузным с максвелловским распределением по скоростям диффузно отраженных молекул. Часть $(1 - \alpha)$ молекул отражается зеркально. Температура диффузно отраженных молекул равна температуре стенки. От плоскостей симметрии молекулы отражаются зеркально.

Расчеты производились на основе численных методов первого и второго порядка точности. Несмотря на то, что решается уравнение Больцмана с нулевым интегралом столкновений, расчет довольно трудоемкий, так как число узлов сетки в пространстве скоростей равно 10^4 . Таким образом, решается система из 10^4 гиперболических уравнений адвекции, связанных граничными условиями на

стенках сосудов и трубки. Время расчета одного варианта на виртуальной машине с динамически выделенным диском 2GB и 8GB ОЗУ на 4 потоках составило около 1 часа. Результаты расчета представлены на рис. 2–4. Расход нормирован на расход через отверстие (т.е. при чисто зеркальном отражении, $\alpha=0$).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 20-08-00634, 20-08-00278) и НИЦ Курчатовский институт (приказ № 1919 от 25.09.2020 г.).

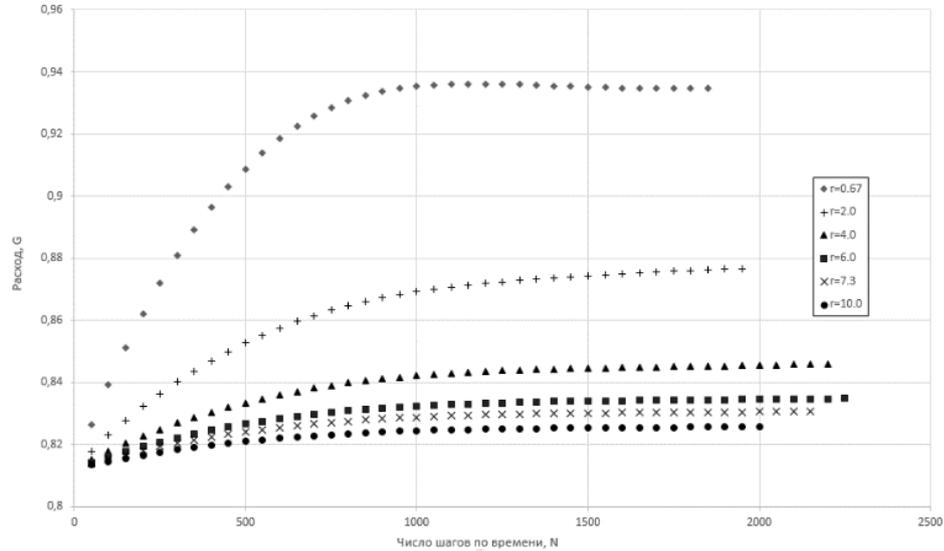


Рис. 2. Зависимость расхода от числа шагов по времени для разных значений γ

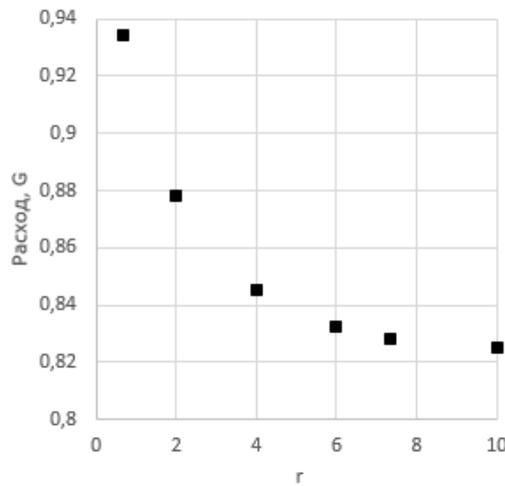


Рис. 3. Зависимость расхода в установившемся режиме от γ при $\alpha=1$

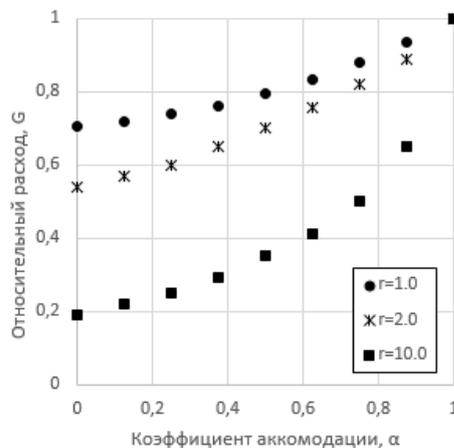


Рис. 4. Зависимость установившегося расхода от коэффициента аккомодации для разных значений γ

Литература

1. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. М., «Наука», 1967. 440 с.
2. Knudsen M., Ann. Physik, 31(4), 205(1910).
3. Smoluchowski M. Zur Kinetischen Theorie der Transpiration und Diffusion Verdünnter Gase // Ann. der Physik, 1910, V. 33, 4 series, P. 1559–1570.
4. Clausing P. Über die Strömung sehr verdünnter Gase durch Röhren von beliebiger Länge // Ann. der Physik, 1932, V. 12, 5th series, P. 961–989. (The Journal of Vacuum Science and Technology, 1971, V. 8, N 5, P. 636–646.)
5. Clausing P., Ann. D. // Physik 12, 5 reP (1932).

УДК 519.876.5

Исследование неравновесных газокINETических процессов на основе компьютерных моделей ударных волн в микроканалах

А.А. Бабайлов¹, И.В. Говорун², Т.А. Сазыкина²

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В данной работе изучаются и моделируются процессы формирования и распространения ударных волн в микроканалах. Явления, связанные с ударными волнами, встречаются не только в сплошных средах, но и в разреженных газах, для которых протекание процессов сильно зависит от числа Кнудсена. Характерная граница уверенной применимости уравнений сплошной среды для таких ситуаций соответствует значению числа Кнудсена 0.01, а превышение этого значения делает необходимым использование аппарата кинетической теории для решения задач численного моделирования, которые представляют большой интерес для практического применения. Так, например, была предсказана возможность генерирования молекулярных пучков высокой энергии, которая контролировалась бы начальным отношением давлений в толкающей и измерительной секциях ударной трубы [1]

Труба, в которой происходит моделирование ударных волн, являясь геометрически однородной, представляет собой плоский (двумерный) канал, длина которого существенно превышает ширину. В начальный момент времени ударная труба разделена непроницаемой перегородкой на два отсека, которые условно называются толкающей и измерительной секциями, схема установки представлена на рис. 1. Обе секции заполнены одинаковым газом аргоном, являясь инертным газом, часто используется в реальных экспериментах с ударными волнами, помимо того он дешев в производстве.

Давление газа в толкающей секции в начальный момент времени в 10 раз больше, чем в измерительной секции, температуры одинаковы по обе стороны от непроницаемой перегородки.

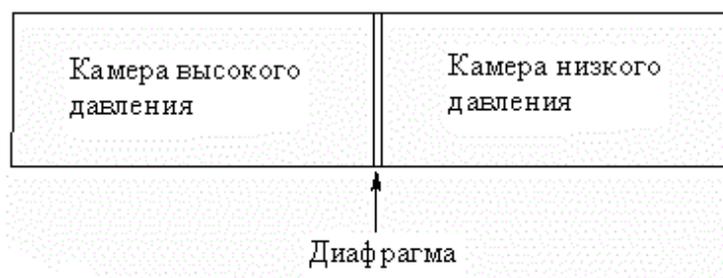


Рис. 1. Схематическое изображение ударной трубы

При резком удалении перегородки из-за начального перепада давления в трубе возникает ударная волна, которая движется внутри измерительной секции. В работе рассматривается двумерное плоское течение газа, что соответствует течению в щели, с двумя типами граничных условий: диффузное и зеркальное отражение.

Расчет процессов формирования и распространения ударной волны производится на основе решения кинетического уравнения Больцмана, определяющего временную эволюцию функции распределения газа [2]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi^r \frac{\partial f}{\partial x^r} = I \left(\xi^r, \mathbf{r}, t \right) \quad (1)$$

Для описания пространственной геометрии задачи используется прямоугольная равномерная сетка. Параметры газа вычисляются при помощи численного интегрирования по скоростной векторной переменной

$\frac{\mathbf{r}}{\xi} = \frac{p}{m}$ молекулярной функции распределения $f(\xi, \mathbf{x}, t)$, которая находится из конечно-разностного решения кинетического уравнения Больцмана, (1).

Пространственный перенос (левая часть уравнения Больцмана) рассчитывается с помощью TVD-схемы с диффузными граничными условиями на стенках секций, интеграл столкновений рассчитывается консервативным проекционным методом для молекулярной модели жестких сфер [3], формула для которого имеет вид:

$$I(\xi, \mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{b_{\max}} \int_0^{\infty} (ff_1' - ff_1) gb \cdot db d\varepsilon d\xi.$$

В процессе выполнения данной работы был создан программный аппарат, позволяющий моделировать течение ударных волн в микроканалах для тех значений чисел Кнудсена, для которых применение гидродинамического описания задачи не является корректным. Моделирование позволяет наблюдать процессы формирования, распространения, отражения от торцов канала, а также затухания ударной волны для различных размеров ударной трубы и типов граничных условий, а также определять положение фронта ударной волны в рассматриваемый момент времени. Разработанный комплекс программных средств дает возможность для получения локальных значений всех термодинамических величин, описывающих систему, а также позволяет визуализировать выходные данные в различных форматах, наиболее удобных для дальнейшего изучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 20-08-00634, 20-08-00278) и НИЦ Курчатовский институт (приказ № 1919 от 25.09.2020 г.).

Литература

1. *Nobuya Miyoshi et al.*: Development of Ultra Small Shock Tube for High Energy Molecular Beam Source. In: 26th Int. Symposium on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conference Proceedings 1084, P. 557–562, (2009).
2. *Аникин, Ю.А.* Введение в основы разностных методов на примере уравнения газовой адвекции. М., 2007. 47 с.
3. *Черемисин, Ф.Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. 1997. Т. 357, 1, с. 53–56.
4. *Коган М.Н.* Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
5. *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. Под ред. акад. Н.Н. Боголюбова. М.: Издательство иностранной литературы, 1960.

УДК 534-16

Моделирование и исследование трещиноватых геологических структур

Н.Ю. Романенко^{1,2}, Н.И. Хохлов^{1,2}, Ю.Ю. Клосс^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Полезные ископаемые, такие как нефть и природный газ, являются важнейшей частью российского топливно-энергетического комплекса. В связи со значительным истощением имеющихся месторождений актуальной является задача поиска новых. Одним из наиболее часто применяемых геофизических методов является сейсморазведка, основанная на распространении и рассеянии сейсмических волн в анизотропных геологических средах.

Анализ таких сред требует разработки эффективных методов моделирования поведения волн в упругих анизотропных средах с микро- и макротрещинами.

Для описания процессов применяются различные математические модели, учитывающие неупругие процессы. Широко используется акустическая аппроксимация. Для численного решения системы уравнений используются такие методы как: разностные временные схемы [2, 3], спектральные элементы [4, 5] и т.д. Данная работа является продолжением исследования анизотропных свойств среды с помощью программного обеспечения, позволяющего проводить расчеты сеточно-характеристическим методом на треугольных, четырехгранных, параллелепипедных, криволинейных структурных и шестигранных сетках [1].

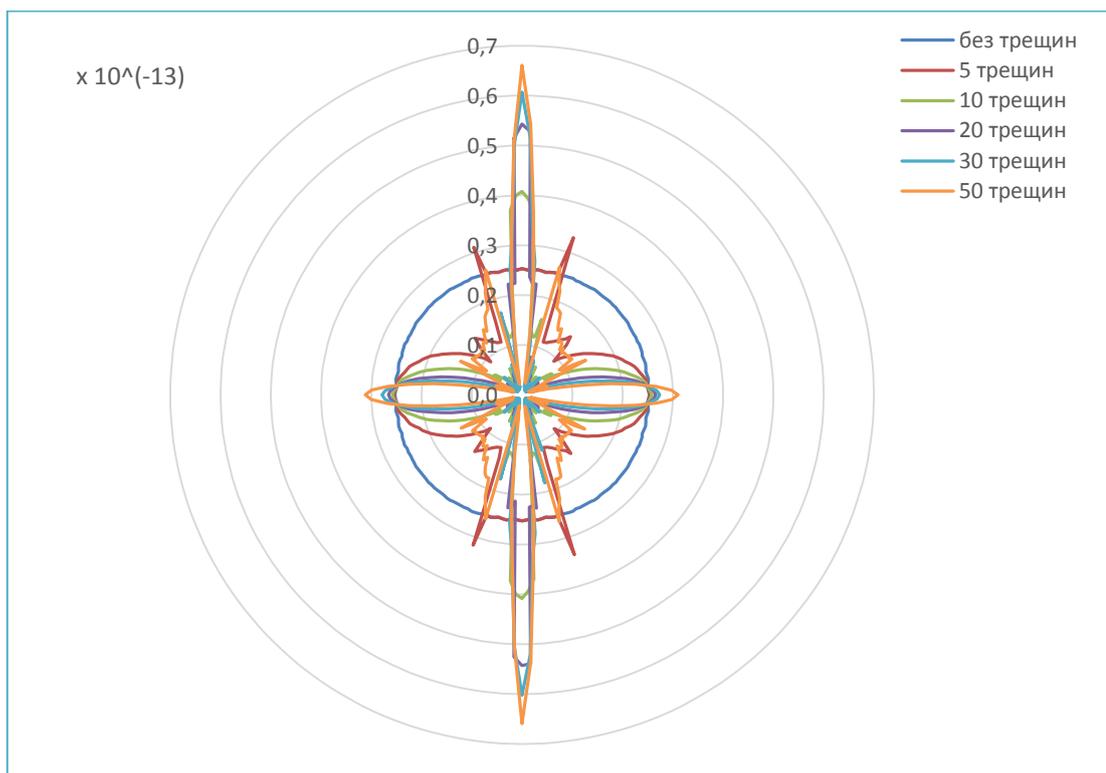


Рис. 1. Предложенный подход упрощает включение трещиноватых объектов в сейсмические модели и позволяет исследовать анизотропные свойства среды и может быть использован для интерпретации сейсмических данных в районах со сложными трещиноватыми структурами

Сеточно-характеристический метод (GCM) [6, 7] основан на представлении уравнений движения линейной упругой среды в следующем виде:

$$q_t + A_1 q_x + A_2 q_y = 0$$

Здесь $q(t, x, y)$ – вектор неизвестных полей, имеющий 5 компонент, равный:

$$q = \begin{pmatrix} v \\ T \end{pmatrix} = [v_1 v_2 T_{11} T_{22} T_{12}]^T,$$

где v – скорость, T – тензор напряжений, q_t – частная производная по t ; q_x и q_y – частные производные вектора q по x и y соответственно.

Матрицы A_k , $k = 1, 2$, являются матрицами 5×5 и задаются следующим образом:

$$A_1 = - \begin{pmatrix} 0 & 0 & \rho^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho^{-1} \\ \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$A_2 = - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \rho^{-1} \\ 0 & 0 & 0 & \rho^{-1} & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ \mu & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Целью данной работы является проведение численного исследования временной и кинетической анизотропии для модельной задачи с различными параметрами среды. Исследуется компактная

сеточно-характеристическая схема на прямоугольных вычислительных сетках. Проводится численная оценка анизотропии сред для разного числа и расположения однородных и дискретных трещиноватых структур при различных волновых импульсах и параметрах среды (рис. 1).

Литература

1. Muratov M V and Petrov I B 2019 Smart Innovation, Systems and Technologies // 133 120–131.
2. Dablain, M.A. The application of high-order differencing to the scalar wave equation // *Geophysics* 1986, 51, 54–66.
3. Moczo, P., Robertsson, J.O.A., Eisner, L. Advances in Wave Propagation in Heterogeneous Earth. *Adv. Geophys* // 2007, 48, 1–606.
4. Komatitsch, D., Vilotte, J.P. The spectral element method: an efficient tool to simulate the seismic response of 2D and 3D geological structures // *Bull. Seismol. Soc. Am.* 1998, 88, 368–392.
5. Chaljub, E. Komatitsch, D. Vilotte, J.-P., Capdeville, Y., Valette, B., Festa, G. Spectral element analysis in seismology // *Adv. Geophys.* 2007, 48, 365–419.
6. Kvasov, I., Petrov, I. *Numerical Modeling of Seismic Responses from Fractured Reservoirs by the Grid-Characteristic Method*, Leviant, V., Ed., Society of Exploration Geophysicists: Tulsa, OK, USA, 2019.
7. Favorskaya, A.V., Zhdanov, M.S., Khokhlov, N.I., Petrov, I.B. Modelling the Wave Phenomena in Acoustic and Elastic Media with Sharp Variations of Physical Properties Using the Grid-Characteristic Method // *Geophys. Prospect.* 2018, 66, 1485–1502.

Секция нанооптики и спектроскопии

УДК 533.951

Квантовая электронная плазма, плазмонные резонансы и толщина тонкой металлической пленки

Н.В. Зверев¹, А.А. Зотов²

¹Московский государственный областной университет

²Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

В последнее время вследствие бурного развития нанотехнологий большое значение приобретает вопрос достаточно точного измерения толщин тонких металлических пленок. Имеющиеся оптические методы дают лишь усредненные значения толщин таких пленок с точностью, не превосходящей 10% [1]. Поэтому необходим другой, более точный метод определения толщин металлических пленок.

Таким перспективным методом является метод плазмонных резонансов [2]. Этот метод основан на возникновении резонансов продольных волн плазмонов в плазме электронов проводимости, расположенной между параллельными поверхностями тонкой проводящей пленки, в случае зеркального отражения электронов от поверхностей пленки. Для определения толщины пленки используют резонансные частоты энергетического коэффициента поглощения электромагнитного Е-излучения (напряженность поля **E** лежит в плоскости падения излучения).

В работе [2] были изучены плазмонные резонансы классической электронной плазмы. Однако в случае нанометровых толщин металлических пленок необходимо учитывать квантовые волновые свойства электронов проводимости [3]. В данном исследовании нами рассматривается квантовая вырожденная электронная плазма.

Пусть металлическая пленка толщиной d расположена между двумя прозрачными средами с диэлектрическими проницаемостями ε_1 и ε_2 . Считаем, что Е-излучение частотой ω падает на пленку со стороны среды с ε_1 под углом θ . Тогда резонансы продольных плазмонов возникают при частотах $\omega = \omega_{res}$, удовлетворяющих условию [2, 4]:

$$\operatorname{Re} \varepsilon_l(\omega_{res}, k_n) = 0, \quad (1)$$

где $\varepsilon_l(\omega, k)$ – продольная диэлектрическая проницаемость электронной плазмы, а число k_n равно

$$k_n = \sqrt{\left(\frac{\pi n}{d}\right)^2 + k_x^2}, \quad k_x = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_1} \sin \theta. \quad (2)$$

Здесь c – скорость света, а целые числа $n = 1, 3, 5, \dots$

В работе [5] получено выражение для продольной проницаемости квантовой вырожденной электронной плазмы при температуре $T = 0$ К:

$$\varepsilon_l(\omega, k) = 1 + \frac{3}{4Q^2} \frac{(\Omega + i\gamma)F(\Omega + i\gamma, Q)F(0, Q)}{\Omega F(0, Q) + i\gamma F(\Omega + i\gamma, Q)}, \quad (3)$$

где функция $F(\Omega + i\gamma, Q)$ зависит от следующих безразмерных величин и переменных:

$$\Omega = \frac{\omega}{\omega_p}, \quad Q = \frac{v_F k}{\omega_p}, \quad \gamma = \frac{1}{\omega_p \tau}, \quad \Omega_{\pm} = \Omega \pm \frac{1}{2} r Q^2, \quad r = \frac{\hbar \omega_p}{m_e v_F^2}. \quad (4)$$

Здесь ω_p , v_F , τ и m_e – соответственно плазменная частота, скорость Ферми, время релаксации и эффективная масса электронов проводимости, а \hbar – постоянная Планка.

Частоты плазмонных резонансов ω_{res} удовлетворяют соотношениям [2, 4]:

$$\omega_{res} > \omega_p, \quad \omega_{res} \sim \omega_p. \quad (5)$$

Кроме того, данные частоты прежде всего зависят от толщины пленки d , а также от ω_p , v_F , как это следует из формул (1) – (4). Частоты ω_{res} практически не зависят от величин θ , τ , ε_1 и ε_2 при выполнении условий:

$$d \ll \frac{c}{\omega_p}, \quad d \gg \sqrt{\frac{\hbar}{m_e \omega_p}}, \quad \omega_p \tau \gg 1. \quad (6)$$

Первое из условий (6) следует из (2) и (5) с учетом требования $k_x \ll k_n$, необходимого для независимости ω_{res} от θ . Второе из условий (6) следует из (4) и (5) с учетом требования малости квантовых эффектов $rQ_n^2 \ll 1$. И наконец, третье условие (6) является требованием $\gamma \ll 1$.

Из (1) – (4) находим, что

$$\omega_{res} = \omega_p f\left(\frac{\pi n v_F}{\omega_p d}, \frac{\hbar \omega_p}{m_e v_F^2}\right), \quad (7)$$

где безразмерная функция $f(Q, r)$ определяется из (1) – (4) при $k_x = 0$ и $\gamma = 0$. Отметим, что соотношение (7) справедливо при выполнении условий (6).

Нами выполнены численные расчеты коэффициента поглощения A Е-излучения (см. [3]) в случае пленки разной толщины из золота. Для золота на основе данных из справочника [6] были рассчитаны величины $\omega_p = 1.375 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$, $v_F = 2.244 \cdot 10^5 \text{ м/с}$, $\tau = 2.9 \cdot 10^{-14} \text{ с}$ в предположении эффективной массы $m_e = 9 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$. Тогда выполняется третье условие (6). Выбранные толщины d пленки удовлетворяют первому и второму условиям (6).

Результаты численных расчетов (рис. 1) качественно подтверждают соотношения (5) и формулу (7) и показывают, что частоты плазмонных резонансов определяются с относительной погрешностью, не превосходящей 1%. Это дает возможность определять с учетом формулы (7) толщины d металлических пленок с точностью не хуже 1%.

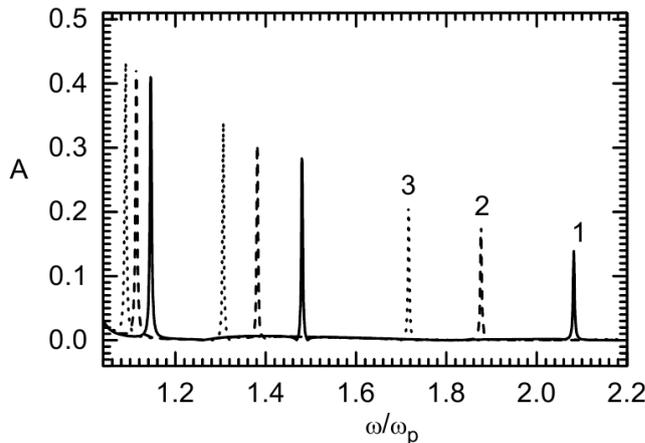


Рис. 1. Зависимость коэффициента поглощения A от частоты ω для пленки из золота: 1 – $d = 1.4 \text{ нм}$; 2 – $d = 1.5 \text{ нм}$; 3 – $d = 1.6 \text{ нм}$. Величины $\theta = 60^\circ$, $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 2$, $\omega_p = 1.375 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$

Авторы благодарны проф. Юшканову А.А. и проф. Беляеву В.В. за полезные замечания и предложения.

Работа поддержана грантом РФФИ № 19-07-00537 А и грантом Губернатора Московской области № 18 от 24 июля 2020 г.

Литература

1. Белов М.Л. [и др.]. Лазерный рефлектометрический метод измерения толщины и оптических характеристик тонких пленок в процессе их роста // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия: Приборостроение. 2011. Т. 83, № 2. С. 16.
2. Латышев А.В., Юшканов А.А. Определение толщины нанопленки с помощью резонансных частот // Квантовая электроника. 2015. Т. 45, № 3. С. 270.

3. *Yushkanov A.A. and Zverev N.V.* Quantum Electron Plasma, Visible and Ultraviolet P-wave and Thin Metallic Film // Phys. Lett. A. 2017. V. 381. P. 679.
4. *Jones W.E., Kliewer K.L. and Fuchs R.* Nonlocal Theory of the Optical Properties of Thin Metallic Films // Phys. Rev. 1969. V. 178(3). P. 1201.
5. *Латышев А.В., Юшканов А.А.* Продольная электрическая проводимость в квантовой плазме с переменной частотой столкновений в рамках подхода Мермина // Теор. и Матем. Физ. 2014. Т. 178, № 1. С. 147.
6. *Бабичев А.П. [и др.]*. Физические величины: справочник / под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.

УДК 535.422,543.42

Трехмерная флуоресцентная DHPSF-наноскопия коллоидных полупроводниковых нанокристаллов (квантовых точек)

*И.Ю. Еремчев^{1,2,3}, Д.В. Прокопова⁴, Н.Н. Лосевский⁴, И.Т. Мынжасаров²,
С.П. Котова⁴, А.В. Наумов^{1,2,3}*

¹Институт спектроскопии РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Московский педагогический государственный университет

⁴Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Самарский филиал

Трехмерная DHPSF-микроскопия сверхвысокого разрешения – метод наноскопии с использованием биспиарльных пучков света, которые в англоязычной литературе получили название double helix point spread function (DHPSF). В основу данной техники были положены методы анализа и синтеза когерентных световых полей, где используется свойство спиральных пучков света, распределение интенсивности которых сохраняется при распространении с точностью до масштаба и вращения [1, 2, 3].

В данной технике излучение образца преобразуется при помощи дифракционного оптического элемента (фазовой маски) таким образом, что флуоресцентное изображение образца может быть описано двухлепестковой функцией, ориентация (угол поворота) которой однозначно связана с глубиной залегания источника света по отношению к фокальной плоскости объектива микроскопа.

Для проведения экспериментов был модернизирован люминесцентный микроскоп при помощи добавления дифракционного оптического элемента в блок регистрации. Процедура расчета ДОЭ представляет алгоритм Гершберга-Сакстона, где коррекция поля происходит в нескольких опорных плоскостях [4]. В качестве начального приближения использовался спиральный пучок, который можно представить в виде суперпозиции пяти мод Лагерра–Гаусса:

$$F = L_{0,0} + L_{1,2} + L_{2,4} + L_{3,6} + L_{4,8} \quad (8)$$

В данной работе сравнивались точности восстановления двух фазовых масок: оптимизированной и неоптимизированной. Оптимизированная фазовая маска была рассчитана для пространственно-однородного распределения интенсивности падающего пучка, неоптимизированная фазовая маска была рассчитана для распределения интенсивности, создаваемым конкретным микрообъективом Carl Zeiss 100x, 1.3NA (рис. 1) [5].

Результаты работы показали, что точность восстановления координаты в 1.5 раза выше при работе с оптимизированной фазовой маской.

Были проведены эксперименты по трекингу квантовых точек CdSeS/ZnS в вязкой анизотропной среде. Для анализа траектории движения использовалась формула:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = 2Dt^\alpha, \quad (9)$$

где $\langle \Delta x^2 \rangle$ – среднеквадратичное отклонение (mean square displacement, MSD) по одной из осей (данном случае по оси x), D – коэффициент диффузии, t – время. Для Броуновского движения $\alpha = 1$ – нормальная диффузия, случай, когда α не равен 1 называется аномальной диффузией ($\alpha < 1$ – субдиффузия, $\alpha > 1$ – супердиффузия). Стандартным методом определения характера диффузии является поиск значения α при помощи линейного фитирования. Из (2):

$$\ln(\langle \Delta x^2 \rangle) = \alpha \ln(t) + \ln(2D). \quad (10)$$

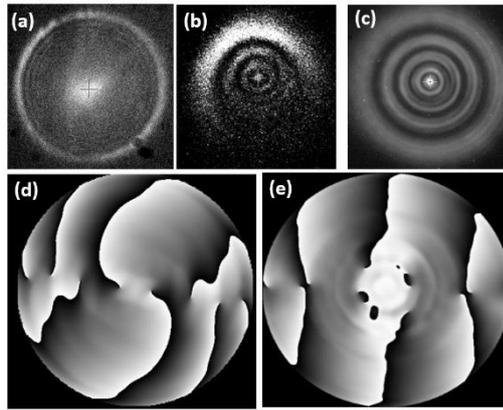


Рис. 1. Примеры пространственного распределения интенсивности люминесценции от одиночных точечных объектов в параллельных пучках, создаваемых высокоапертурными микрообъективами: (a) иммерсионный CFI Nikon 60x 1.2 NA, (b) CF Nikon 100 x, 0.95 NA, (c) CarlZeiss 100x, 1.3NA. Пространственные распределения фазы, закодированные в градациях серого (черный – 0, белый – 2π) (т.н. «фазовые маски»): (d) – «не оптимизированная», (e) – «оптимизированная»

Были выявлены нормальная диффузия для поперечных направлений движения и субдиффузия для продольного направления, связанная с геометрией подложки (решеточный профиль). Трехмерный трекинг наночастиц при помощи техники DHPF показал свою перспективность при изучении анизотропных сред на наличие неоднородностей.

Литература

1. *Abramochkin, E.G. and V. G. Volostnikov*, Spiral light beams. *Physics-Uspekhi*, 2004. 47(12): P. 1177–1203.
2. *Volostnikov, V. G.*, Modern optics of Gaussian beams // *Physics-Uspekhi*, 2012. 55(4): P. 412–420.
3. *Pavani, S.R.P. and R. Piestun*. Three dimensional tracking of fluorescent microparticles using a photon-limited double-helix response system // *Optics Express*, 2008. 16(26): P. 22048–22057.
4. *Volostnikov, V. G.*, et al. Diffractive elements based on spiral beams as devices for determining the depth of bedding of radiation sources // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2016. 80(7): P. 766–769.
5. *Prokopova, D.V.*, et al. Improving the Energy Efficiency of Diffraction Optical Elements for 3D Nanoscopy // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2019. 83(12): P. 1453–1458.

УДК 535-34

Численное моделирование влияния малых вариаций толщин слоёв на спектры отражения многослойных зеркал мягкого рентгеновского диапазона

Е. В. Носач¹, Е. А. Вишняков², А. О. Колесников², А. Н. Шатохин², Е. Н. Рагозин²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

В настоящей работе рассмотрено воздействие флуктуаций толщин слоёв на спектр отражения характерного представителя класса многослойных зеркал мягкого рентгеновского диапазона: периодической молибден-кремниевой структуры.

Модельная структура представляет собой $N_{\text{layers}} = 100$ чередующихся слоёв Mo и Si на подложке из SiO₂. Невозмущённые толщины слоёв одинаковы и составляют $l_0 = 40 \text{ \AA}$. В качестве характерного размера среднеквадратичной флуктуации толщины слоя была выбрана оценка межатомного расстояния $\sigma_0 = n^{-1/3}$, где n – концентрация атомов вещества слоя. Для выбранных веществ эти размеры составляют $\sigma_0(\text{Si}) = 2.7 \text{ \AA}$, $\sigma_0(\text{Mo}) = 2.5 \text{ \AA}$. Для каждого значения σ , варьируемого от нуля до $3\sigma_0$ с шагом в $0.1\sigma_0$, генерировался набор из $N_{\{1\}} = 100$ векторов толщин слоёв размерностью N_{layers} , в которых каждая компонента распределена нормально с математическим ожиданием l_0 и среднеквадратичным отклонением σ . Для каждого вектора толщин слоёв в наборе, методом рекуррентных соотношений [1, 2] были рассчитаны коэффициенты отражения $R_{s,p}(\lambda)$ для s - и p -поляризованного излучения в $N_{\lambda} = 200$ точках диапазона от $\lambda_1 = 100 \text{ \AA}$ до $\lambda_2 = 200 \text{ \AA}$. Характерный пример зависимостей $R_{s,p}(\lambda)$ приведён на рис. 1 (угол падения 35°).

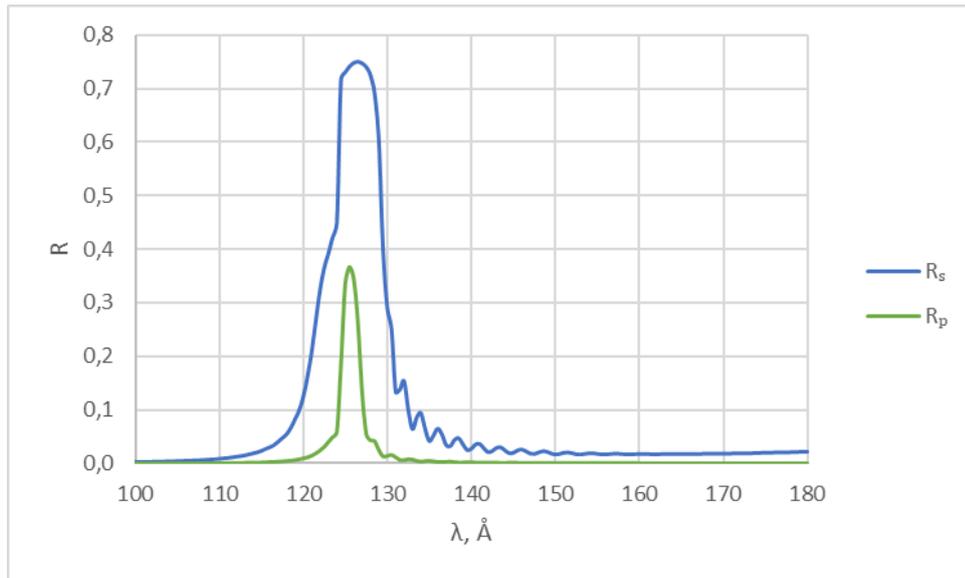


Рис. 1. Спектральные зависимости коэффициентов отражения многослойного периодического зеркала для s- и p-поляризованного излучения, угол падения $\varphi = 35^\circ$

Из соотношения интегрального и максимального коэффициентов отражения определяется эффективная ширина пика по формуле (1). Характерная поляризующая способность определялась по формуле (2).

$$\Delta\lambda_{s,p} = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} R_{s,p}(\lambda) d\lambda / \max R_{s,p}(\lambda) \quad (1)$$

$$P = \frac{\max R_s - \max R_p}{\max R_s + \max R_p} \quad (2)$$

Было выяснено, что что длина волны, на которой достигается максимум коэффициента отражения, в среднем мало зависит от возмущений толщин слоёв (рис. 2).

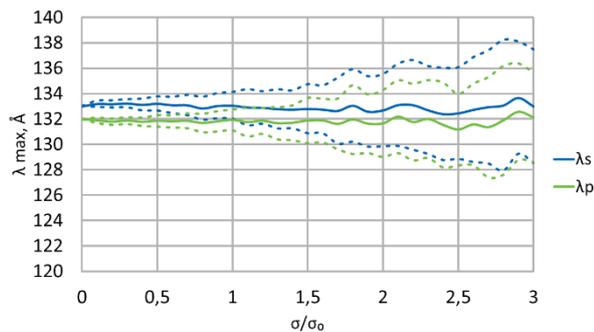


Рис. 2. Зависимость λ_{\max} от вариации толщин слоёв при угле падения излучения $\varphi = 35^\circ$. Здесь и далее сплошными линиями указаны средние значения по сгенерированной выборке, пунктиром – максимальные и минимальные

Увеличение среднеквадратичного отклонения толщин слоёв от состояния периодической структуры приводит к «размытию» пика на графике зависимости коэффициента отражения от длины волны, проявляющемся в снижении его высоты и увеличении ширины (рис. 3).

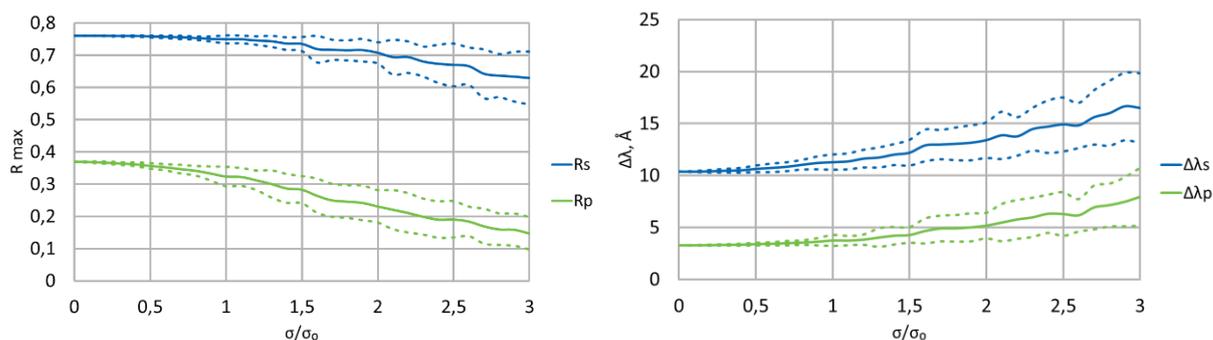


Рис. 3. Воздействие вариации толщин слоёв на максимальную величину и ширину пиков коэффициентов отражения, угол падения излучения $\varphi = 35^\circ$

Интересно, что внесение стохастических поправок в толщины слоёв с разной эффективностью воздействует на отражение излучения с разной поляризацией, изменяя характерную поляризующую способность зеркала (рис. 4).

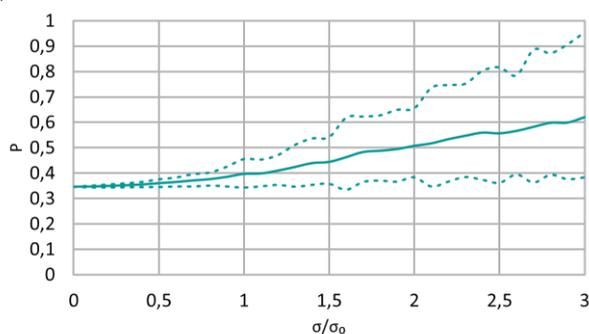


Рис. 4. Воздействие вариации толщин слоёв на эффективную поляризующую способность, угол падения излучения $\varphi = 35^\circ$

Литература

1. *А. В. Виноградов, И. В. Кожевников* Многослойные рентгеновские зеркала // Труды ФИАН 1989. Т. 196. С. 62.
2. *Н.Н. Колачевский, А.С. Пирожков, Е.Н. Рагозин* Широкополосные рентгенооптические элементы на основе аperiодических многослойных структур // Квантовая электроника. 2000. Т. 30. С. 428.

УДК 537.9

Определение средней длины свободного пробега между актами неупругого рассеяния методами квантовой теории поля

Базулин И.А.^{1,2,3} Виноградова А.В.^{1,2,4} Коньков А.А.^{1,2} Рогозин К.А.^{1,2,3} Мязин А.С.^{1,5}

¹Национальный исследовательский университет «МЭИ»

²ГНЦ РФ ТРИНИТИ

³НИЦ «Курчатовский институт»

⁴ОАО ВТИ

⁵Объединенный институт высоких температур РАН

В настоящее время существует множество способов химического и фазового анализа твёрдых тел, их поверхностных и приповерхностных слоёв. К этим способам относится электронная спектроскопия, основными представителями которой являются рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, оже-спектроскопия и ультрафиолетовая фотоэлектронная спектроскопия. Для получения количественных данных о составе исследуемого образца измеряется интенсивность вылетающих из тела электронов и сравнивается с эталонной. Однако для проведения измерений состава внешнего атомарного слоя необходимо обладать знанием о глубине, с которой происходит эмиссия фотоэлектронов. Эта информация требуется исследователям для того, чтобы возможно было оценить вклад от каждого слоя атомов мишени в общий сигнал. Такие данные можно извлечь из процессов неупругого рассеяния фо-

тоэлектронов в твёрдом теле, происходящих при их движении к поверхности. Точность конечного результата анализа напрямую будет зависеть от точности определения такой величины, как средняя длина свободного пробега между актами неупругого рассеяния. В настоящее время существует большое количество данных по средней длине свободного пробега в различных материалах и при различных энергиях налетающих электронов. При этом не существует единой теории, которая в полной мере описывала бы процесс неупругого рассеяния электронов на электрон-ионной плазме твёрдого тела. Вся суть и сложности этой проблемы отчётливо видны при рассмотрении низкотемпературной максвелловской электрон-ионной плазмы. Такая плазма является классической, поэтому зависимости от постоянной Планка при её описании нет. Поток налетающих электронов также классичен, ведь он обладает температурой большей, чем температура исследуемой плазмы, а взаимодействие таких электронов с плазмой определяется законом Кулона. Искусственное введение данной величины неадекватно.

В особенности это касается работающих с не квантованным электромагнитным полем полуклассических теорий, потому что они являются логически незамкнутыми. Это приводит к тому, что на данный момент не существует единой теоретической модели, из которой непосредственно следовали бы такие параметры, как сечение неупругого рассеяния и средняя длина свободного пробега между актами неупругого рассеяния электронов, которые в полной мере совпадали бы с экспериментальными данными. Все существующие в настоящее время описания процессов неупругого рассеяния электронов довольно сильно отличаются друг от друга и содержат в себе большое количество эмпирических подгоночных параметров. Такой подход не позволит получить универсальной теории, из которой напрямую можно было бы получить все необходимые для интерпретации экспериментов величины.

В данной работе построена квантово-механическая модель взаимодействия заряженных частиц с электрон-ионной плазмой твёрдого тела с применением методов квантовой теории поля. Было произведено вторичное квантование и получены уравнения распространения коллективных возбуждений в представлении функций Грина. Получена система матричных уравнений Дайсона и определён явный вид массового оператора электронного квантового поля. На основе данной системы были получены запаздывающая и опережающая временные функции Грина и с их помощью определена аналитическая зависимость средней длины свободного пробега между актами неупругого рассеяния от энергии налетающих электронов.

Было произведено сравнение полученных по формуле данной работы средних длин свободного пробега между актами неупругого рассеяния с рассчитанными длинами по другим известным формулам (рис. 1).

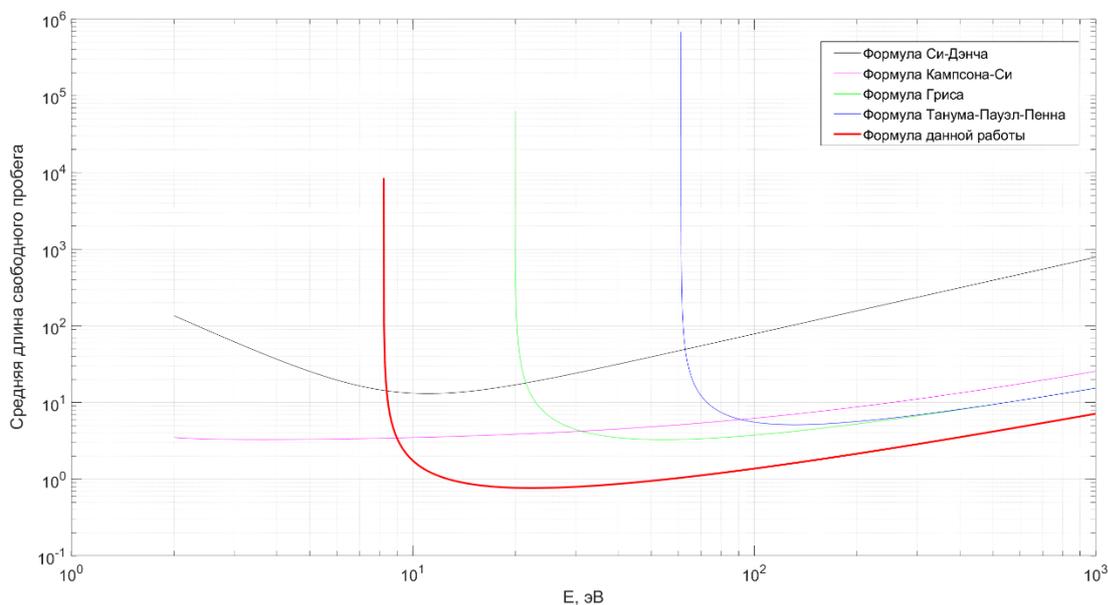


Рис. 1. Сравнение зависимостей средней длины свободного пробега между актами неупругого рассеяния для меди

Литература

1. Seah M.P. Practical Surface Analysis by Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy / eds. D. Briggs and M.P. Seah. Chichester: Wiley: 1990. P. 201.
2. Powell C.J. // J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 47: 197 (1988).
3. Jablonski A. Powell J.C. Surf. Sci. Reports, 47: 33 (2002).

Исследование влияния электрон-фононного взаимодействия на фотолюминесценцию GeV центров в алмазе в температурной области 20–180 К

А.А. Разгулов^{1,2}, С.Г. Ляпин^{1,2}, А.П. Новиков¹, Е.А. Екимов¹

¹ Институт физики высоких давлений им. Верещагина РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

На протяжении нескольких десятилетий центры окраски в алмазах находятся в фокусе исследовательского интереса, ввиду многообещающих перспектив их практического применения, среди которых обычно выделяют использование в оптических квантовых сетях обработки и передачи информации, а также в качестве датчика температуры в оптической термометрии. В этой связи тщательное исследование низкотемпературной фотолюминесценции центров окраски в алмазе приобретает все большее значение.

В настоящее время известны две модели, описывающие экспериментально наблюдаемые сдвиг положения и уширение бесфононной линии центра окраски с ростом температуры. Первая модель [1, 2], рассматривает электрон-фононные процессы (неупругое (NV) и упругое (SiV) рассеяние комбинационного типа) с акустическими фононами E-симметрии в основном и возбужденном состояниях. В рамках этой модели были предложены зависимости T^5 для ширины бесфононной линии (БФЛ) комплекса NV [2] и T^3 для ширины и сдвига БФЛ комплекса SiV [1]. Вторая модель [3, 4], основанная на квадратичном электрон-фононном взаимодействии при наличии сильного смягчения упругих постоянных в возбужденном состоянии, предсказывает зависимости $aT^3 + bT^7$ и $cT^2 - dT^4$ для ширины и сдвига БФЛ. Таким образом, ввиду имеющихся различий между предложенными в разных моделях температурными зависимостями для ширины и сдвига БФЛ, тщательный анализ экспериментально полученных зависимостей может прояснить механизмы электрон-фононного взаимодействия в центрах окраски в алмазе.

В работах [5, 6] было показано, что полный наблюдаемый сдвиг БФЛ $\Delta E_{total}(T)$ складывается из двух составляющих: вклада температурного расширения решётки $\Delta E_{Latt.}(T)$ и электрон-фононного взаимодействия $\Delta E_{e-ph}(T)$ (ур 1):

$$\Delta E_{total}(T) = \Delta E_{Latt.}(T) + \Delta E_{e-ph}(T) \quad (1)$$

Согласно [5, 6], влияние температурного уширения решётки на сдвиг БФЛ $\Delta E_{Latt.}(T)$ может быть рассчитано следующим образом:

$$|\Delta E_{Latt.}(T)| = AB \int_0^T e(T) dT \quad (2)$$

где A – барический коэффициент сдвига БФЛ GeV центра в случае гидростатического давления, B – объемный модуль упругости алмаза и $e(T)$ коэффициент объемного расширения алмазной решётки [7].

Таким образом, для корректного описания вклада электрон-фононного взаимодействия $\Delta E_{e-ph}(T)$ из полного наблюдаемого сдвига $\Delta E_{total}(T)$ необходимо вычесть вклад объемного расширения алмазной решётки $\Delta E_{Latt.}(T)$.

В настоящей работе была исследована фотолюминесценция GeV центров в микрокристаллических НРНТ алмазах в широком диапазоне давлений (до 6.9 ГПа) и температур (20–180К). Полученный барический коэффициент положения БФЛ GeV центра ($dE/dp = 3.29(2)$ мэВ/ГПа) позволил впервые разделить вклады температурного уширения решётки и электрон-фононного взаимодействия в температурный сдвиг БФЛ GeV центра. Было установлено, что температурные зависимости как полуширины, так и вклада электрон-фононного взаимодействия в сдвиг БФЛ GeV центра наилучшим образом описываются зависимостями, предложенными во второй модели, что может быть интерпретировано, как преобладание вклада квадратичного электрон-фононного взаимодействия в температурное уширение и сдвиг БФЛ. Помимо этого, в представленной работе была впервые исследована зависимость энергии квазилокальной колебательной моды от температуры. Было обнаружено, что энергия квазилокальной колебательной моды (КЛКМ) уменьшается с ростом температуры. В силу отсутствия теоретических моделей данного эффекта в литературе, было предложено качественное объяснение, опирающееся на ангармонизм данного квазилокального колебания, описанный в работе [8].

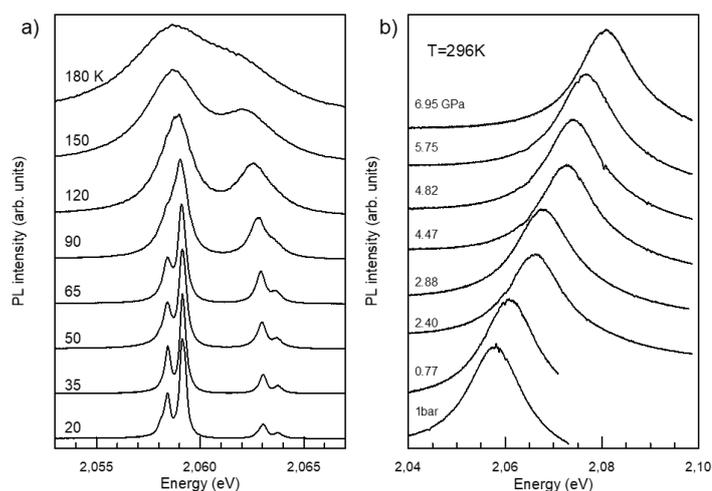


Рис. 1. (а) Эволюция бесфононной линии GeV центра с увеличением температуры; (б) эволюция бесфононной линии GeV центра с ростом давления

Работа была поддержана грантом РФФИ № 19-12-00407.

Литература

1. *Jahnke K.D., Sipahigil A., Binder J.M., Doherty M.W., Metsch M., Rogers L.J., Manson N.B., Lukin M.D., Jelezko F.*, Electron-phonon processes of the silicon-vacancy centre in diamond // *New J. Phys.*, 17 (2015), 043011.
2. *Fu K.-M.C., Santori C., Barclay P. E., Rogers L.J, Manson N.B., Beausoleil R.G.*, Observation of the Dynamic Jahn-Teller Effect in the Excited States of Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond // *Phys. Rev. Lett.*, 103 (2009), 256404.
3. *Hizhnyakov V., Kaasik H., Sildos I.*, Zero-Phonon Lines: The Effect of a Strong Softening of Elastic Springs in the Excited State // *Phys. Status Solidi B*, 234 (2002) 644–653.
4. *Hizhnyakov V., Boltrushko V., Kaasik H., Sildos I.*, Phase relaxation in the vicinity of the dynamic instability: anomalous temperature dependence of zero-phonon line // *J. Lumin.*, 107 (2004) 351–358.
5. *Davies G.*, The Jahn-Teller Effect and Vibronic Coupling at Deep Levels in Diamond // *ReP. Prog. Phys.*, 44 (1981) 787–830.
6. *Doherty M.W., Acosta V. M., Jarmola A., Barson M.S.J., Manson N.B., Budker D., Hollenberg L.C.L.*, Temperature shifts of the resonances of the NV-center in diamond // *Phys. Rev. B*, 90 (2014) 041201(R).
7. *Sato T., Ohashi K., Sudoh T., Haruna K., Maeta H.*, Thermal expansion of a high purity synthetic diamond single crystal at low temperatures // *Phys. Rev. B*, 65 (2002), 092102.
8. *Ekimov E.A., Krivobok V. S., Lyapin S.G., Sherin P. S., Gavva V. A., Kondrin M.V.* Anharmonicity effects in impurity-vacancy centers in diamond revealed by isotopic shifts and optical measurements // *Phys. Rev. B*, 95 (2017) 094113.

УДК: 535.375.54

ГКР-активные подложки из декорированных золотом кремниевых нанонитей для безметочного обнаружения билирубина

*А.Д. Карташова¹, Е.А. Алексеева¹, И. В. Божьев¹, М.Б. Гонгальский¹, К.А. Гончар¹,
Ж.В. Самсонова^{1,2}, Л.А. Осминкина^{1,3}*

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический факультет

³Институт биологического приборостроения РАН

В настоящее время актуальной задачей является разработка новых чувствительных, селективных, экономичных и экспрессных методик для диагностики биологических молекул и биообъектов. Возможность на ранней стадии обнаружить причину заболевания и вовремя начать терапию повышает вероятность скорого выздоровления.

У около 60% младенцев в первую неделю жизни появляется желтуха, что зачастую является физиологической нормой, однако в 5–10% случаев пожелтение кожи указывает на патологию в развитии младенца [1]. Желтуха проявляется в связи с повышением уровня билирубина в крови, продукта

распада гемоглобина, и может являться следствием нарушений в организме, например: гемолитической болезни, врожденных инфекций или внутренних кровоизлияний. В случае патологической желтухи концентрация билирубина в крови новорожденного превышает 17 мг/дл (≈ 300 мкМ): становится необходимым срочное лечение фототерапией [2].

Повышение уровня билирубина в крови может диагностироваться и у взрослого человека, зачастую вследствие проблем с печенью, вызванных инфекциями (гепатит А), патологиями (синдром Жильбера, синдром Ротора) или заболеваниями (цирроз печени) [3]. Желтуха, как симптом заболевания, необязательно проявляется сразу, и своевременный анализ крови или мочи на уровень билирубина при заболеваниях печени поможет подобрать корректное лечение и предотвратить пожелтение кожи и слизистых, а также дальнейшее развитие болезни. В настоящее время для анализа уровня билирубина в крови используется биохимический анализ крови, а для анализа в моче – стандартный общий анализ мочи.

Настоящее исследование направлено на разработку методики, позволяющей точно и быстро определить наличие билирубина как в крови, так и в моче.

Эффект гигантского комбинационного рассеяния света (ГКР) заключается в усилении интенсивности сигнала комбинационного рассеяния молекул анализируемого вещества, адсорбированного на наноструктурах благородного металла, за счет возбуждения в них локализованного плазмонного резонанса [4]. В качестве ГКР-активных подложек в данной работе были использованы подложки массива кремниевых нанонитей [5], декорированные золотыми наночастицами (Au@SiNWs) (см. рис. 1а). ГКР-активность подложки была исследована сначала с использованием молекул 4-меркаптопиридина (4-MPy). При этом сигнал 4-MPy регистрировался вплоть до концентраций 10^{-8} М.

Для сорбции молекул билирубина поверхность подложек Au@SiNWs модифицировалась с использованием 3-аминопропил триэтоксисилана (APTES). В результате модификации поверхность нанонитей покрывалась аминогруппами (NH_2) и приобретала положительный заряд, что способствовало эффективной сорбции молекул билирубина за счет электростатического взаимодействия.

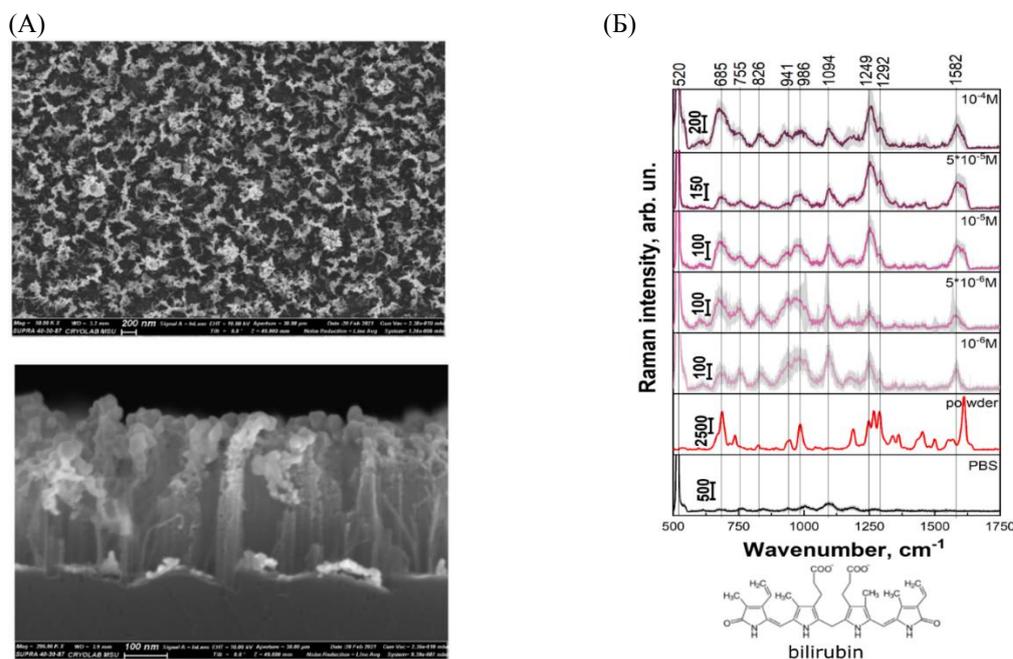


Рис. 1. (А) Типичный вид ГКР-активной подложки Au@SiNWs , вид сверху (вверху) и вид сбоку (внизу), (Б) спектр комбинационного рассеяния порошка BR и усредненные спектры ГКР различных концентраций BR. Серая полоса в усредненных спектрах показывает стандартные отклонения, рассчитанные примерно из 300 спектров: по 100 спектров для трех разных областей подложки

Продемонстрирована возможность регистрации ГКР сигнала молекул билирубина вплоть до концентрации 10^{-6} М (см. рис. 1б), что соответствует верхней границе клинической нормы.

Таким образом, в настоящей работе впервые показана возможность экспресс-детектирования молекул билирубина с использованием ГКР-активных композитных подложек: кремниевых нанонитей, декорированных наночастицами золота. Представленные результаты могут найти применение в разработке новых экспрессных методик анализа крови и мочи на билирубин.

Работа выполнена под руководством с.н.с. Осминкиной Л.А. при поддержке гранта РФФ № 20-12-00297.

Литература

1. American Academy of Pediatrics. Practice parameter: management of hyperbilirubinemia in the healthy term newborn. *Pediatrics* 1994; 94: 558–565.
2. *Maisels M., Gifford K.* Normal serum bilirubin levels in newborns and effect of breast-feeding. *Pediatrics* 1986; 78: 837–843.
3. *Roche S., Kobos R.* Jaundice in the adult patient. *Am Fam Physician.* 2004; 69: 299–304.
4. *Osminkina, L. A. et al.* Gold nanoflowers grown in a porous Si/SiO₂ matrix: The fabrication process and plasmonic properties. *Applied Surface Science* 2020, 507, 144989.
5. *Žukovskaja et al.* Rapid detection of the bacterial biomarker pyocyanin in artificial sputum using a SERS-active silicon nanowire matrix covered by bimetallic noble metal nanoparticles. *Talanta* 2019, 202, 171–177.

УДК 535

Исследование фотофизических свойств одиночных нанокристаллов перовскита Cs₄PbBr₆

И.А. Муканов^{1,3}, И.Ю. Еремчев^{1,3}, А.О. Тарасевич^{1,2}, А.Г. Сон^{4,3}, Е.В. Текшина⁴, А.А. Егорова⁴, Н. А. Короткова⁴, С.А. Козюхин^{4,3}, А.В. Наумов^{1,3}, И.Г. Щельцыкин⁵

¹Институт спектроскопии РАН

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

³Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

⁴Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН

⁵Лундский университет

Перовскиты представляют собой класс полупроводниковых материалов, получаемых методами «низкотемпературного» синтеза из растворов. Перовскиты характеризуются малым влиянием дефектов на квантовый выход люминесценции [1, 2], большими величинами длин свободного пробега носителей заряда, а также простотой и низкой стоимостью производства. Интерес к перовскитам связан с перспективами их использования в качестве материала для создания элементов высокоэффективных солнечных батарей, светодиодов [3], активных сред для генерации лазерного излучения [4], а также материала для создания источников неклассического излучения [5].

В данной работе исследовались люминесцентные свойства нанокристаллов со структурой перовскит состава Cs₄PbBr₆, полученных в стабилизирующем неполярном растворителе с использованием ультразвуковой обработки [6]. Размер наночастиц оценивался методами просвечивающей электронной микроскопии и методом динамического светорассеяния. Структура и состав синтезированных нанокристаллов были определены с помощью рентгенофазового анализа и масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой. Полученные наночастицы представляют собой ромбоэдрические нанокристаллы нулевой размерности (0D) со структурой перовскит типа A₄BX₆ [7] со стехиометрическим соотношением элементов Cs:Pb:Br равным 4:1:6, размер которых варьируется в диапазоне от 10 до 30 нм. Синтезированные объекты исследования обладают люминесценцией в видимом диапазоне спектра и представляют практический интерес для использования в светоизлучающих устройствах.

Для получения более полной информации о фотофизических свойствах вещества полезно проводить измерения не для большого количества излучателей, а для изолированных единичных источников, что помогает избавиться от усреднения по ансамблю излучателей и выявить особенности отдельных наночастиц. В частности, это позволяет исследовать свойства метастабильных тушителей люминесценции, приводящих к эффекту мерцания люминесценции одиночных наночастиц. Необходимо отметить, что вопрос о природе мерцания одиночных кристаллов до сих пор является предметом обширных дискуссий, исследование которого имеет большой фундаментальный и прикладной интерес [8].

Для оптических исследований единичных изолированных наночастиц были приготовлены образцы на покровном стекле с очень низкой поверхностной плотностью излучателей (менее одной частицы на 1 мкм²) методом центрифугирования. Поверхностная плотность частиц на подложке контролировалась с помощью атомно-силовой микроскопии. Исследования проводились с использованием высокочувствительного люминесцентного микроскопа-спектрометра [9].

Анализ спектров люминесценции продемонстрировал наличие разброса положения пика спектра люминесценции, что, возможно, является следствием дисперсии размеров наночастиц. Для единичных наночастиц были проведены измерения временной динамики интенсивности люминесценции в микроскопической и макроскопической шкале времен. Первое позволило исследовать динамику затухания люминесцентного сигнала для отдельных наночастиц и выявить наличие как минимум двух компонент с быстрой (в наносекундном диапазоне) и медленной скоростью релаксации (в субмикросекундном диапазоне). Исследование же временной динамики

на большем масштабе времен позволило выявить наличие ярко выраженного эффекта мерцания люминесценции для части исследованных наночастиц. Помимо этого, было проведено исследование кросскорреляционных функций второго порядка сигнала люминесценции, зарегистрированного в схеме Хэнбери Брауна и Твисса в режиме счета одиночных фотонов. Во всех случаях наблюдалась только частичная антигруппировка (провал в кросскорреляционной функции в районе нулевых задержек), что говорит о том, что исследованные кристаллы не являются идеальными источниками одиночных фотонов, в отличие от случая перовскитных частиц с размером менее 10 нм, проявляющих яркую антигруппировку [10].

Данная работа была осуществлена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 20–12–00202).

Литература

1. *Protesescu L., Yakunin S., Bodnarchuk M. I., Krieg F., Caputo R., Hendon C. H., Yang R. X., Walsh A. and Kovalenko M. V.*, Nano Lett., 2015, 15, 3692–3696, <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/nl5048779>.
2. *Gonzalez-Carrero S., Galian R. E. and Pe' rez-Prieto J.*, Mater. J. Chem. A, 2015, 3, 9187–9193.
3. *Song, J. Li, J., Li, X., Xu, L., Dong, Y., Zeng, H.* Adv. Mater. 2015, 27, 7162–7167.
4. *Yakunin, S., Protesescu, L., Krieg, F., Bodnarchuk, M. I., Nedelcu, G., Humer, M., De Luca, G., Fiebig, M., Heiss, W., Kovalenko, M. V.* Nat. Commun. 2015, 6, 8056.
5. *Park, Y.-S., Guo, S., Makarov, N. S., Klimov, V. I.* ACS Nano 2015, 9, 10386–10393.
6. *Li X. [u dp.]. CsPbX3 Quantum Dots for Lighting and Displays: Roomerature Synthesis, Photoluminescence Superiorities, Underlying Origins and White Light-Emitting Diodes // Adv. Funct. Mater.* 2016. Т. 26, № 15. С. 2435–2445.
7. *Zou, S., Liu, C., Li, R., Jiang, F., Chen, X., Liu, Y., & Hong, M.* (2019). From Nonluminescent to Blue-Emitting Cs₄PbBr₆ Nanocrystals: Tailoring the Insulator Bandgap of 0D Perovskite through Sn Cation Doping. Advanced Materials, 31(24), 1–9. <https://doi.org/10.1002/adma.201900606>.
8. *Eremchev, I. Y., Tarasevich, A. O., Li, J., Naumov, A. V., Scheblykin, I. G.* Adv. Opt. Mater. 2021, 9 (3), 2001596.
9. *Eremchev, I. Y., Eremchev, M. Y., Naumov, A. V.* Physics-Uspekhi 2019, 62 (3), 294–303.
10. *Hu F. et al.* Superior optical properties of perovskite nanocrystals as single photon emitters // ACS nano. 2015. V. 9, N 12. P. 12410–12416.

УДК 535.37

Плеэкситонная связь в смесях квантовых точек CdS и наночастиц серебра

В.Н. Деренко, О.В. Овчинников, М.С. Смирнов

Воронежский государственный университет

В последние годы возрастает интерес к гибридным наноструктурам, построенным на основе полупроводниковых коллоидных квантовых точек (КТ) и плазмонных наночастиц (НЧ) [1]. Актуальной проблемой является установление эффектов, объясняющих изменение спектральных свойств в гибридных плеэкситонных наноструктурах, в состав которых входят КТ, обладающие одновременно экситонной и рекомбинационной фотолюминесценцией (ФЛ).

В данной работе представлены результаты, демонстрирующие проявление плеэкситонного взаимодействия в виде трансформации ФЛ КТ CdS в присутствии НЧ Ag. Выявлено тушение экситонной ФЛ и разгорание рекомбинационной ФЛ КТ CdS при взаимодействии с НЧ Ag.

Компонентами гибридных наноструктур служили КТ CdS, покрытые олеиновой кислотой, и сферические НЧ Ag, пассивированные олеиламином. Принципы сборки гибридных ассоциатов основывались на возможности π-стекинг взаимодействия углеродного каркаса молекул пассиваторов, размер которых составлял от 1.34 до 1.8 нм. Дополнительная реакционная способность достигалась зарядом интерфейсов КТ и НЧ. Для формирования гибридных структур коллоидные растворы КТ CdS и НЧ Ag смешивали в кювете в молярных соотношениях $[v(\text{НЧ})]:[v(\text{КТ})] \sim 3 \cdot 10^{-6}$ и $[v(\text{НЧ})]:[v(\text{КТ})] \sim 3 \cdot 10^{-5}$ молярных долей (м.д.).

Согласно результатам ПЭМ размеры исходных образцов составили: 10–15 нм для НЧ Ag (рис. 1а), ~ 4 нм для КТ CdS (рис. 1б). При этом в смеси КТ и НЧ заметная доля КТ CdS расположена вблизи интерфейсов металлических НЧ (рис. 1в). Следовательно, наблюдаемая картина однозначно свидетельствует в пользу сборки гибридных наносистем.

Характерная особенность для экситонного перехода в оптическом поглощении КТ CdS расположена в области 410 нм (рис. 2, зеленая кривая), что соответствует среднему размеру КТ 3.7 нм [2]. Спектр ФЛ КТ CdS имеет две полосы (рис. 2, черная кривая). Первая полоса ($\lambda_{\text{max}}=430$ нм) отнесена

к экситонной ФЛ, вторая полоса ($\lambda_{max}=603$ нм) относится к ФЛ, возникающей в результате излучательной рекомбинации на донорно-акцепторных парах [3]. Максимум спектра экстинкции света НЧ Ag расположен при 415 нм (рис. 2, желтая кривая). Таким образом, спектральные свойства синтезированных компонентов обеспечивают значительное перекрытие пика экстинкции света НЧ Ag с экситонной полосой ФЛ и частичное перекрытие с полосой рекомбинационной ФЛ.

Для исходного образца КТ CdS интенсивность экситонной ФЛ преобладает над рекомбинационной. Однако в смесях с НЧ Ag для экситонной полосы ФЛ наблюдается тушение в области 430 нм (рис. 2, синяя и красная кривые). При этом зарегистрировано ускорение кинетики ФЛ, что указывает на безызлучательный резонансный перенос энергии возбуждения (FRET) от экситона КТ CdS к НЧ Ag [4]. Тушение экситонной ФЛ и сокращение её времени жизни усиливается с ростом концентрации акцепторов (НЧ Ag). Для максимальной концентрации НЧ время жизни ФЛ сокращается от 7.4 до 2.5 нс, а эффективность переноса составляет 0.66 (табл. 1) [5].

Вместе с тем, для второй полосы ФЛ КТ CdS обнаружено отличающееся поведение при сборке ассоциатов. Для образца ассоциатов КТ CdS и НЧ Ag $[v(\text{НЧ})]:[v(\text{КТ})] \sim 3 \cdot 10^{-5}$, напротив, наблюдается увеличение интенсивности ФЛ в 1.8 раза (рис. 2, красная кривая), а для смеси $[v(\text{НЧ})]:[v(\text{КТ})] \sim 3 \cdot 10^{-6}$ – в 1.15 раз (рис. 2, синяя кривая) наряду с уменьшением времени жизни люминесценции. Полученные результаты указывают на проявление эффекта Перселла [6]. По-видимому, наночастицы серебра выполняют роль нанорезонаторов, моды колебаний которых близки к частоте максимума рекомбинационной ФЛ КТ CdS.

С учетом имеющихся данных фактор Перселла можно оценить по следующей формуле:

$$F_p = \frac{\gamma_{sp}}{\gamma_{sp}^0} = \frac{QY \cdot \tau^0}{QY^0 \cdot \tau} \quad (1)$$

где γ_{sp}^0 и γ_{sp} – скорости спонтанных переходов в отсутствие и присутствии НЧ, QY^0 и QY – квантовые выходы ФЛ в отсутствие и присутствии НЧ, τ^0 и τ – среднее время жизни ФЛ в отсутствие и присутствии НЧ. Фактор Перселла, полученный по формуле (1) оказывается равным 5.3.

С другой стороны, фактор Перселла можно вычислить, используя формулу из [7]:

$$F_p = \frac{3\lambda_r^3}{4\pi^2 Q V_m} \frac{\omega_r^2}{(\omega_r^2/Q^2 + (\omega_r - \omega_0)^2)} \quad (2)$$

где Q и V_m – добротность и модовый объем резонатора, λ – длина волны излучения в среде, в которой находится резонатор, ω_0 – частота излучательного перехода в КТ.

Оценка фактора Перселла из формулы (2) дало величину $F_p = 180$. Это значение превышает полученное нами в (1). Однако оно не является точным и показывает предельно достижимую величину. Выражение (2) не учитывает расстояние между НЧ и КТ, которое имеет существенное значение для реальной величины фактора плазмонного усиления люминесценции Перселла [8].

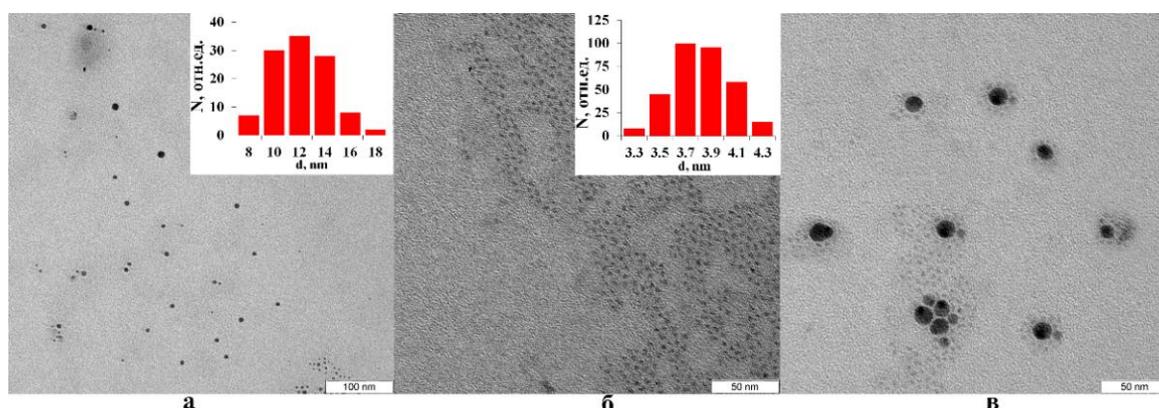


Рис. 1. ПЭМ изображения Ag НЧ (а), КТ CdS (б) и их смесей (в)

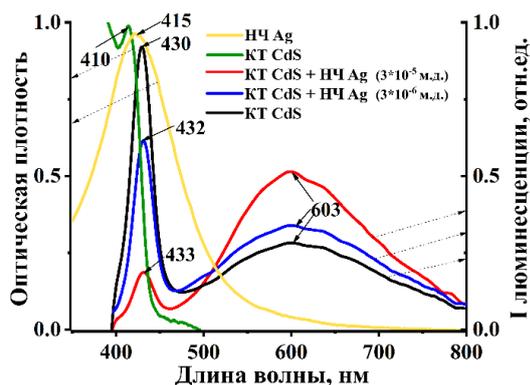


Таблица 1. Оценка эффективности переноса энергии

Образец	ϕ
КТ CdS + НЧ Ag ($3 \cdot 10^{-5}$ м.д.)	0.66
КТ CdS + НЧ Ag ($3 \cdot 10^{-6}$ м.д.)	0.28

Рис. 2. Оптические свойства КТ CdS, НЧ Ag и смесей на их основе

Таким образом, величина экспериментально определённого фактора Перселла позволяет заключить, что в исследуемых гибридных ассоциатах скорость спонтанного перехода возрастает более чем в 5 раз, и это также является доводом в пользу сборки металл-полупроводниковой структуры, в которой осуществляется режим слабой плазмон-экситонной связи.

Работа выполнена при поддержке грантом Президента РФ, проект НШ-2613.2020.2.

Литература

1. Zhang H., Su Q., Chen S // Nature Communications. 2020. V. 11. P. 2826-1-8.
2. Hosoki K., Tayagaki T., Yamamoto S., Matsuda K., Kanemitsu Y // Physical Review Letters. 2008. V. 100. P. 207404.
3. Yu W. W., Qu L., Guo W., Peng X // Chemistry of Materials 2003. 15 (14) P. 2854–2860.
4. Ovchinnikov O.V., Smirnov M.S., Korolev N.V., Golovinski P. A., Vitukhnovsky A.G // J. of Lumines. 2016. V. 179. P. 413–419.
5. Smirnov M.S // Optics and spectroscopy. 2017. V 123, № 5. P. 704–716.
6. Purcell E.M // Physical Review. 1946. V. 69, № 11-12. P. 681.
7. Oraevsky A. N // Physics-Uspexhi 37 1994 (4) P. 393–405.
8. Guzatov D.V., Vaschenko S.V., Stankevich V.V., Lunevich A.Y., Glukhov Y.F., Gaponenko S.V // The Journal of Physical Chemistry C 2012. 116 (19) P. 10723–10733.

УДК 535.015

Исследование влияния центрального иона на фотолюминесцентные свойства координационных соединений с лигандом из класса 1,3-дикетонов

Поликовский Т.А.¹, Коришунов В.М.^{1,2}, Тайдаков И.В.²

¹Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

В настоящее время существует потребность в разработке новых высокоэффективных люминофоров, излучающих в синей спектральной области. Такой интерес связан с потенциальным применением люминофоров в качестве активного излучающего слоя в органических светоизлучающих диодах белого свечения (WOLEDs). Излучение белого света такими структурами основано на принципе частичной или полной конверсии синего излучения органического люминофора в фотолюминесценцию в зеленой и красной областях спектра. Одним из перспективных классов материалов, которые можно успешно применить в качестве излучающего слоя в WOLED, являются координационные соединения ионов различных металлов с органическими лигандами [1, 2]. Однако до сих пор не существует надежной теоретической модели, позволяющей предсказать оптические свойства соединения на основе его структуры [3, 4].

В работе были исследованы оптические свойства новых координационных соединений лиганда 1,3-дикетон - циклогексил(5-гидрокси-3-метил-1-фенил-1Н-пиразо-4-ил)метанона с ионами редкоземельных элементов, в частности Sc(III), Gd(III), La(III) и Lu(III), а также с ионами переходных металлов Al(III), In(III) и Ga(III).

Спектры оптического поглощения, полученные для чистого лиганда и его комплекса, состоят из нескольких спектральных полос с максимумами поглощения на длинах волн 240 нм и 267 нм. Данные спектральные компоненты связаны с поглощением молекул лиганда. Спектры, полученные для комплексов ионов редкоземельных элементов, качественно повторяют спектр чистого лиганда, при увеличении молярной экстинкции с 3×10^3 до 2.2×10^4 л \times моль $^{-1} \times$ см $^{-1}$. Для них молярная экстинкция монотонно возрастает с 2.2×10^4 to 5.5×10^4 л \times моль $^{-1} \times$ см $^{-1}$ при замене центрального иона на более тяжелый. Напротив, спектры оптического поглощения комплексов с ионами переходных металлов отличаются от спектра чистого лиганда. Во-первых, молярная экстинкция этих соединений значительно увеличивается в 18–30 раз по сравнению с чистым лигандом. Во-вторых, для комплексов с ионами переходных металлов характерен красный сдвиг спектра относительно спектров остальных соединений и чистого лиганда.

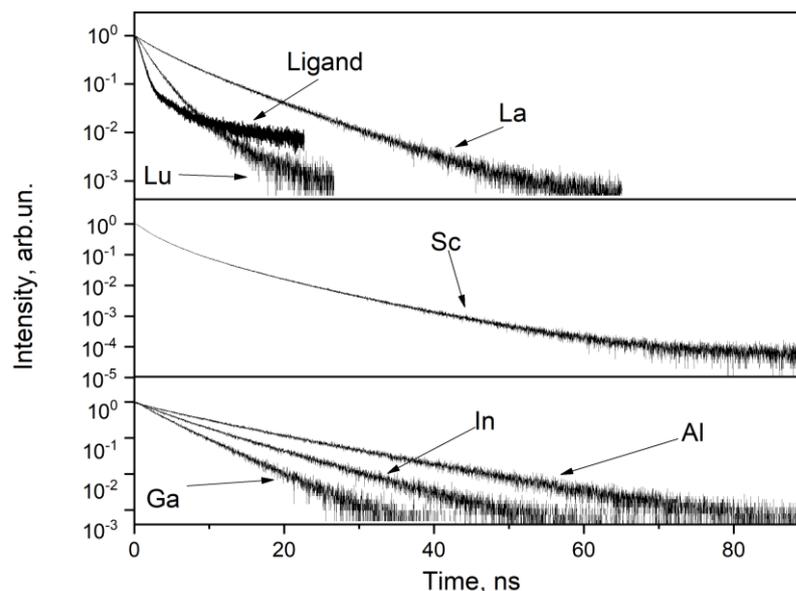


Рис. 1. Кинетики фотолюминесценции исследованных соединений при возбуждении на длине волны 340 нм

Спектры и кинетики фотолюминесценции комплексов регистрировали в твердом виде при комнатной температуре 300К с помощью спектрофлуориметра Fluorolog FL3-22.

Обнаружено, что координирование иона лигандом приводит к значительному синему сдвигу максимума люминесценции с 530 нм для чистого лиганда до 420–470 нм для комплексов. При этом, для комплексов переходных металлов максимумы расположены на длинах волн 455–465 нм с тенденцией к росту длины волны с заменой центрального иона на более тяжелый. Для комплексов с ионами редкоземельных элементов максимум находится в диапазоне 428–436 нм, за исключением комплекса с ионом Gd(III), максимум фотолюминесценции которого оказался на длине волны 490 нм. Это было объяснено появлением вклада фосфоресценции при комнатной температуре в спектре этого соединения. Так же в спектре люминесценции комплекса Gd(III) обнаружено плечо в коротковолновой области 410–430 нм, которое было отнесено к флуоресценции этого же лиганда. Чтобы подтвердить фосфоресцентную природу излучения, была проведена серия экспериментов по времяразрешенной люминесценции. При временной задержке 300 мкс плечо в коротковолновой области спектра исчезло, что явно свидетельствует о фосфоресцентной природе спектральной полосы с максимумом на длине волны 490 нм в спектре фотолюминесценции комплекса с ионом Gd(III). Для данного соединения была измерена кинетика фотолюминесценции. Кинетика имела моноэкспоненциальный вид с характерным временем затухания 36 мкс.

Кинетики фотолюминесценции (см. рис. 1) были аппроксимированы моноэкспоненциальной функцией для комплексов переходных металлов и биэкспоненциальной функцией для соединений ионов редкоземельных элементов. Времена жизни были оценены в пределах от 2 до 10 нс и менее 1 нс для чистого лиганда.

Таким образом, комплексообразование лиганда с ионом приводит к многократному увеличению времени жизни, что свидетельствует об увеличении эффективности люминесценции. Установлена зависимость эффективности фотолюминесценции от конкретного иона.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда по проекту № 19-13-00272.

Литература

1. Hasegawa Y., Kitagawa Y., Nakanishi T. Effective photosensitized, electrosensitized, and mechanosensitized luminescence of lanthanide complexes // *NPG Asia Materials*. 2018. V. 10, N 4. P. 52–70.
2. Bünzli J.-C.G. On the design of highly luminescent lanthanide complexes // *Coordination Chemistry Reviews*. 2015. V. 293–294. P. 19–47.
3. Razuvaev Institute of Organometallic Chemistry, Russian Academy of Sciences, ul. Tropinina 49, Nizhny Novgorod, 603950 Russia et al. Photo-physical Properties of IR Luminescent Lanthanide Complexes with Polyfluorinated Ligands // *INEOS OPEN*. 2019. V. 2, N 3.
4. Vitukhnovsky AG, Ambrozevich SA, Korshunov VM. Luminescent properties of complexes based on scandium (III) β -diketonates. *Journal of Luminescence* 2018. V. 201. P. 509–519.

УДК 535.338.32

Квантовая сенсорика на основе холодных атомов

*А.Е. Афанасьев^{1,2}, А.С. Калмыков^{1,2}, Р.В. Куртаев³, А.А. Кортель^{1,2},
П.И. Скакуненко^{1,3,4}, Д.В. Быкова^{1,2}, Д.В. Негров³, В.И. Балыкин^{1,2}*

¹Институт спектроскопии РАН

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

³Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

⁴Сколковский институт науки и технологий

Квантовая сенсорика в настоящее время является активно развивающейся областью науки. Квантовые сенсоры – это приборы для сверхточного измерения ускорения, скорости вращения, гравитационных сил, электромагнитных полей и других физических величин. В основе атомных квантовых сенсоров лежит интерференция ансамбля атомов. Результат интерференции зависит от разности фаз между двумя частями волновой функции, которая, в свою очередь, определяется силами (инерционными, гравитационными, электромагнитными), действующими на атомы при распространении через разные плечи интерферометра.

Лазерное охлаждение атомов позволяет производить монохроматизацию атомного ансамбля и прецизионный контроль внутренних степеней свободы, что необходимо для создания квантовых сенсоров с предельной чувствительностью. В перспективе они могут обладать гораздо более высокой точностью и чувствительностью по сравнению с их классическими аналогами [1].

Наиболее активным направлением в области создания квантовых сенсоров на основе холодных атомов является использование атомных чипов – устройств, объединяющих в себе подходы твердотельной электроники и атомной оптики. Атомными чипами называют устройства, в которых токопроводящие микроскопические структуры, созданные на диэлектрической поверхности, создают трехмерное магнитное поле вблизи этой поверхности, которое может быть использовано для локализации холодных атомов. Данный подход позволяет проводить точную манипуляцию нейтральными атомами на микромасштабах [2].

Целью нашей работы является создание и исследование гравиметра (прибора для сверхточного измерения величины ускорения свободного падения) и атомных часов на основе атомной интерференции с использованием технологии атомного чипа. Мы разработали атомный чип и локализовали $3 \cdot 10^5$ атомов рубидия в U-образной магнитооптической ловушке (U-MOT) в условиях высокого вакуума. Достигнутая концентрация и температура атомов составляют 10^{10} см^{-3} и 200 мК соответственно.

Ловушка образована пересекающимися лазерными лучами и постоянным электрическим током силой 3 А, протекающим через серебряные микропровода атомного чипа. В дальнейшем планируется перезагрузка атомов магнитную ловушку на чипе, чтобы дополнительно охладить их за счет испарительного охлаждения. После этого полученное облако атомов можно использовать в атомном интерферометре для создания квантового сенсора.

Литература

1. *Degen, C. L., Reinhard, F., & Cappellaro, P.* (2017). Quantum sensing. *Reviews of Modern Physics*, 89(3).
2. *R. J. Sewell, J. Dingjan, F. Baumgartner.* (2010). Atom chip for BEC interferometry *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 43 (2010) 051003.

УДК 535.36

Исследование взаимосвязи оптических свойств и гетерогенности системы, обладающей автофлуоресценцией в красной/ БИК области спектра, с использованием оптических методов

***А. Хасан¹, Н.Р. Ровнягина², А.А. Рубекина³, Г.О. Силаев¹,
Б.П. Якимов^{2,3}, Ю.Г. Вайнер^{1,4}, Е.А. Шишкин^{2,3,4}***

¹Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

²Центр цифрового биодизайна ФГАОУ ВО Первого МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России
(Сеченовский Университет)

³Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова

⁴Институт спектроскопии РАН

Лазерная микроскопия – один из наиболее перспективных оптических методов медицинской диагностики, позволяющий получать информацию о самых разнообразных процессах в биологических средах и изучать процессы межмолекулярного взаимодействия в ней, анализировать взаимосвязь между размером частиц и их оптическими свойствами. Данный метод позволяет визуализировать броуновское движение частиц, находящихся в сфокусированном лазерном листе, по сигналу рассеяния от них, а также производить анализ траектории данных наночастиц (НТА) и определять их размер. Также одним из известных методов, основанных на исследовании броуновского движения отдельных частиц, является метод динамического рассеяния света (DLS), который активно применяется для определения ряда важных параметров белка на уровне отдельных молекул (формы, коэффициента диффузии, гидродинамического радиуса и др.).

Эндогенная автофлуоресценция биологических систем является важным источником информации для биомедицинской диагностики. Особый интерес представляет вопрос о молекулярных источниках автофлуоресценции (АФ) в красной/ближней инфракрасной области спектра (БИК). Так, в работе [1] уже было продемонстрировано, что продукты окисления органических компонентов (липидов, белков, аминокислот и др.) могут служить молекулярным источником автофлуоресценции в красной и ближней инфракрасной области детектирования. Возникновение данной АФ также часто сопровождается формированием супрамолекулярных агрегатов, например, при агрегации белков в амилоидные фибриллы [2]. Более того, на примере исследования гетерогенных систем неживых органических соединений и гуминовых веществ, находящихся в водных средах, почвах и органических породах, и обладающих АФ в красной области излучения, было продемонстрировано, что существует взаимосвязь между формированием оптических свойств и характерными размерами исследуемой системы [3]. Таким образом, целью данной работы была проверка возникновения в результате окисления биоорганических молекул агрегации отдельных мономеров в большие супрамолекулярные агрегаты.

Объектом исследования в настоящей работе выступал раствор аминокислоты триптофана (TRP), окисленный с помощью УФ-излучения (максимум эмиссии 254 нм, интенсивность излучения на образце ~ 10 мВт/см², облучение производилось в течение 45 мин при 25 °С). Для исследования гетерогенности системы в водных растворах окисленного с помощью УФ-излучения триптофана были выделены молекулярные фракции размерами менее и более 3 кДа. Был произведен одновременный анализ оптических характеристик исследуемых растворов и размеров, образовавшихся в них наночастиц. Визуализация и определение размеров наночастиц производились методом оптической микроскопии «светового листа» (на длине волны возбуждения 405 нм) по сигналам упругого рассеяния и флуоресценции. В качестве дополнительного метода для анализа размера образующихся наноагрегатов была использована техника динамического рассеяния света (DLS).

В результате проделанной работы было показано, что в гетерогенных системах продуктов окисления аминокислот происходит агрегация отдельных мономеров в наночастицы, при этом размер частиц может достигать нескольких сотен нанометров. Было установлено, что размер агрегатов связан со свойствами поглощения и флуоресценции: фракция агрегатов менее 3 кДа (т.е. наночастицы и отдельные молекулы размером менее 2–3 нм) обладают малым спектральным наклоном поглощения и

высоким квантовым выходом флуоресценции, в отличие от крупных агрегатов (более 3 кДа), которые имеют большие значения спектрального наклона поглощения и низкий квантовый выход флуоресценции.

Полученные в работе результаты указывают на наличие агрегации в растворе в результате фотоокисления и свидетельствуют о значимой роли межмолекулярного взаимодействия в системах с эндогенной флуоресценцией в красной области спектра. Представленные результаты дают ключевую информацию для объяснения механизмов возникновения указанной флуоресценции в различных биологических системах, и имеют важное значение для решения задач биофизики и медицины.

Работа выполнена при поддержке Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина». Работа А.А. Рубекиной поддержана советам по грантам Президента Российской Федерации (стипендия Президента Российской Федерации СП 4410.2021.4).

Литературы

1. *Semenov A.N. et al.* The oxidation-induced autofluorescence hypothesis: Red edge excitation and implications for metabolic imaging // *Molecules*, 2020. P. 1863.
2. *Pansieri, J. et al.* Ultraviolet–visible–near-infrared optical properties of amyloid fibrils shed light on amyloidogenesis // *Nat. Photonics*, 2019. V. 13. P. 473.
3. *Yakimov B.P. et al.* Ultrafast energy transfer determines the formation of fluorescence in DOM and humic substances // *Environmental Science & Technology*, 2021. P. 10365.

УДК 535.34

Исследование сверхтонких и деформационных расщеплений в спектрах поглощения кристаллов $YVO_4\text{-Ho}^{3+}$

Т.А. Иголкина^{1,2}, Е.П. Чукалина¹, С.А. Климин¹

¹Институт спектроскопии РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Кристаллы $YVO_4\text{-Ho}^{3+}$ относятся к широко известному классу соединений ортованадатов AVO_4 ($A=Y, Gd, Lu$) со структурой циркона. Чистые или легированные ионами редкоземельных (РЗ) элементов кристаллы AVO_4 применяются для стандартов частоты в качестве источников излучения, в том числе и как перспективные лазерные среды, а также для приложений в квантовых информационных системах. Реализация оптической квантовой памяти с использованием эффективной многоуровневой системы на основе сверхтонких уровней РЗ ионов успешно осуществлена в кристаллах $Nd:YVO_4$ [1, 2]. В работах [3, 4] энергетический спектр уровней большинства мультиплетов иона Ho^{3+} в кристалле YVO_4 от ИК- до УФ-области спектра был определён из анализа спектров пропускания при разных температурах и низкотемпературных спектров люминесценции. На основе экспериментальных данных в работе [4] выполнен расчёт по теории кристаллического поля. В упомянутых выше спектроскопических исследованиях [3, 4] используемое разрешение не позволило авторам зарегистрировать сверхтонкую структуру (СТС) в оптических спектрах кристаллов $YVO_4\text{-Ho}^{3+}$. Целью настоящей работы является получение информации о сверхтонких расщеплениях штарковских уровней иона Ho^{3+} в YVO_4 и изучение влияния случайных деформаций на форму спектральных линий из анализа температурно-поляризационных зависимостей спектров пропускания, зарегистрированных с высоким спектральным разрешением в области $f\text{-}f$ переходов в ионах Ho^{3+} .

Монокристаллы $YVO_4\text{:Ho}^{3+}$ (0.1 ат.%) были выращены раствор-расплавным методом с использованием флюса $Pb_2V_2O_7$. Исследуемый образец имел толщину 1.13 мм, кристаллографическая ось c находилась в плоскости образца. Спектры поглощения были зарегистрированы на фурье-спектрометре Bruker IFS 125 HR в спектральной области от 4000 до 10000 cm^{-1} с высоким разрешением до 0.05 cm^{-1} , в диапазоне температур от 4 до 300 К. Стабилизация и контроль температуры образца, находящегося в криостате замкнутого цикла Cryomech ST 403, осуществлялись с использованием двухканального термоконтроллера Lake Shore Model 335.

В легированных кристаллах $Ho:YVO_4$ ионы Ho^{3+} замещают ионы Y^{3+} и занимают позиции с точечной группой симметрии D_{2d} . В общем случае в кристаллическом поле энергетические уровни свободного некрамерсовского иона расщепляются на $(2J+1)$ состояний. Волновые функции штарковских уровней трёхвалентного иона Ho^{3+} , находящегося в кристаллической матрице YVO_4 , преобразуются

по четырём синглетным $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4$ и одному дважды вырожденному Γ_5 неприводимым представлениям (НП).

Из анализа температурной зависимости линейно поляризованных спектров пропускания с учётом правил отбора для электро- и магнитодипольных переходов в случае симметрии D_{2d} были определены энергии штарковских уровней возбуждённых мультиплетов 5I_7 и 5I_6 и пяти уровней основного мультиплета 5I_8 , а также НП некоторых штарковских уровней в случаях, где это представилось возможным.

Использование высокого спектрального разрешения позволило наблюдать разрешённую сверхтонкую структуру спектральных линий. Кроме того, в зарегистрированных спектрах также были обнаружены линии, имеющие характерную дублетную форму, которую мы связываем с деформационным расщеплением. Подробный анализ влияния случайных деформаций на профиль спектральной линии был проведён нами ранее в [5]. На рис. 1 представлены примеры линий с хорошо выраженными проявлениями сверхтонкого (линия 1) и деформационного (линия 2) расщеплений.

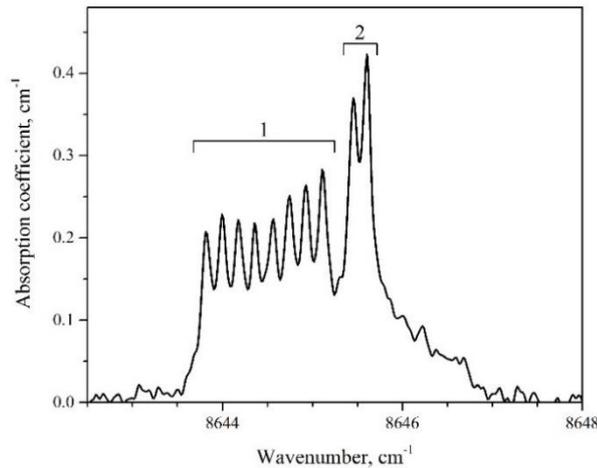


Рис. 1. Линии поглощения в области перехода $^5I_8 \rightarrow ^5I_6$ в ионе Ho^{3+} в кристалле $\text{YVO}_4:\text{Ho}^{3+}$ (0.1 ат.%). $T=20$ К

Сверхтонкая структура обусловлена главным образом магнитодипольным сверхтонким взаимодействием, определяемым магнитным полем $\mathbf{H}(0)$, созданным на ядре электронами, и магнитным моментом ядра μ_I со спином I : $\mathcal{H} = -\mu_I \mathbf{H}(0)$. Оператор Гамильтона для мультиплета с заданным \mathbf{J} определяется выражением [6]:

$$\mathcal{H} = A_J(\mathbf{J}), \quad (1)$$

$$A_J = 2\beta\beta_I g_I \langle r^{-3} \rangle \langle \mathbf{J} \| \mathbf{N} \| \mathbf{J} \rangle, \quad (2)$$

где A_J – постоянная магнитной сверхтонкой структуры, $\langle r^{-3} \rangle$ – среднее значения обратного радиуса электронной орбиты в кубе, β – магнетон Бора, β_I – ядерный магнетон, $\langle \mathbf{J} \| \mathbf{N} \| \mathbf{J} \rangle$ – приведённый матричный элемент.

В первом приближении магнитодипольное сверхтонкое взаимодействие не расщепляет синглетные состояния. Отличными от нуля будут только диагональные матричные элементы матрицы возмущения (1) на волновых функциях дублетов Γ_5 . Для единственного изотопа гольмия $^{165}\text{Ho}^{3+}$ момент ядра $I = 7/2$, $-7/2 \leq m \leq 7/2$. Сверхтонкие уровни остаются дважды вырожденными: состояния $|\Gamma_5^1 m\rangle$ и $|\Gamma_5^2 - m\rangle$ имеют одинаковую энергию. В результате дублеты Γ_5 иона Ho^{3+} в YVO_4 расщепляется магнитодипольным сверхтонким взаимодействием на 8 эквидистантных подуровней.

Используя вычисленные по формуле (2) значения A_J ($A_J(^5I_8) = 0.02687$) и экспериментально определённые величины сверхтонких расщеплений штарковских уровней Γ_5 (ΔE_{HF}), можно определить магнитные g-факторы:

$$|g_z| = 2g_0 \cdot \Delta E_{\text{HF}} / A_J, \quad (3)$$

где g_0 – фактор Ланде. Для четвёртого уровня основного мультиплета $|g_z| = 16.7 \pm 1.5$ ($\Delta E_{\text{HF}} = 0.18 \pm 0.01 \text{ см}^{-1}$).

Литература

1. *De Riedmatten H., Afzelius M., Staudt M.U., Simon C., Gisin N* // Nature. 2008. V. 456. P. 773.
2. *Zhou Z. Q., Lin W. B., Yang M., Li C. F., Guo G. C* // Physical Review Letters. 2012. V. 108. P. 190505.
3. *Fleischman Z.D., Merkle L.D., Newburgh G.A., Dubinskii M.* Spectroscopic analysis of efficient laser material $\text{Ho}^{3+}:\text{YVO}_4$ // Optical Materials Express. 2013. V. 3(8). P. 1176.
4. *Moncorgé R., Velazquez M., Goldner P., Guillot-Noël O., Xu H.L., Nilsson M., Kröll S., Cavalli E., Bettinelli M.* Linear and non-linear spectroscopy of Ho^{3+} -doped YVO_4 and LuVO_4 // Journal of Physics: Condensed Matter. 2005. V. 17(42). P. 6751.
5. *Klimin S.A., Chukalina E.P., Boldyrev K.N., Igolkina T.A., Radionov M.S., Chou M.C., Popova M.N.* High-resolution transmission and luminescence spectroscopy of $\text{Pr}^{3+}:\text{YPO}_4$ // Journal of Luminescence. 2021. V. 235. P. 118003.
6. *Abraham A., Bleaney B.* Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions // Oxford. 1970. 911 P.

УДК 535.371

Влияние типа радикала на фотофизические и люминесцентные свойства новых органических лигандов из класса 1,3-дикетоннов

С.Р. Заниздра¹, М.Т. Метлин^{1,2}, В.М. Коршунов^{1,2}, И.В. Тайдаков²

¹Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
(национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Органические лиганды из класса 1,3-дикетоннов имеют потенциал применения в качестве эффективных сенситизаторов люминесценции в координационных соединениях трехзарядных ионов лантаноидов [1, 2]. Помимо целевых свойств (высокий квантовый выход) люминофоров, данные лиганды обеспечивают им наличие практических свойств – высокую растворимость, пленкообразование, совместимость с технологией изготовления органических светодиодов [3].

Были исследованы методами молекулярной спектроскопии оптические свойства новых органических лигандов с различными радикалами, синтезированных в ФИАН им. П.Н. Лебедева. В частности, получены спектры оптического поглощения и люминесценции. На основании полученных экспериментально данных были установлены зависимости фотофизических свойств от химической структуры молекул лигандов.

Молекула органического лиганда содержит 1,3-дикетонный фрагмент с двумя органическими заместителями (радикалами) в положениях 1 и 3. В качестве одного из заместителей была использована группа CF_3 для уменьшения вероятности безызлучательной релаксации за счёт испускания фононов. В качестве второго заместителя использовались следующие ароматические фрагменты: фенил, 1-метил-пиразол-4-ил, 1-метил-пиррол-2-ил, 2-тиенил, 2-селенофенил, 2-фуриол.

Спектры оптического поглощения растворов исследуемых веществ в ацетонитриле были зарегистрированы с помощью двухлучевого спектрофотометра Jasco V-770. Для всех образцов молярная концентрация составляла величину порядка $5 \times 10^{-6} \text{ М}$. Также было исследовано влияние концентрационных эффектов на форму спектров оптического поглощения и на линейность в законе Бера. Все исследуемые лиганды интенсивно поглощают (E порядка $10^4 \text{ моль}^{-1} \cdot \text{л} \cdot \text{см}^{-1}$) оптическое излучение в спектральном диапазоне от 200 до 400 нм. Длинноволновый край поглощения незначительно изменяется во всех полученных спектрах поскольку не изменяется π -сопряжение при варьировании ароматического фрагмента.

Спектры фотолюминесценции лигандов в кристаллической фазе были зарегистрированы с помощью спектрофлуориметра Fluorolog-QM. Соединения излучают в широком спектральном диапазоне при оптическом возбуждении на длине волны 330 нм, соответствующей π - π^* – электронному переходу

каждого лиганда. Спектры состоят из нескольких спектральных полос: относительно узких (FWHM порядка 50 нм) с максимумами в диапазоне 400–450 нм и широких (FWHM порядка 150 нм) в зелёной спектральной области.

Энергии первого возбуждённого синглетного состояния были оценены как положения 0–0 фононного перехода. Для определения положения 0–0 фононного перехода были построены нормированные графики спектров поглощения и люминесценции в энергетическом представлении. Энергия перехода была определена по абсциссе точки пересечения данных графиков. Обнаружено, что значения энергий лежат в пределах от 24000 см⁻¹ до 28000 см⁻¹.

Установлено, что варьирование заместителя (ароматического фрагмента) в органических лигандах из класса 1,3-дикетонов приводит к значительному энергетическому сдвигу первого возбуждённого синглетного уровня, а также к спектральному сдвигу максимумов флуоресценции. Кроме того, наблюдается изменение формы спектров оптического поглощения вследствие изменения силы осцилляторов электронных переходов в молекулах.

Работа выполнена в ФИАН им. П.Н. Лебедева РАН при поддержке гранта РФФ № 19-13-00272.

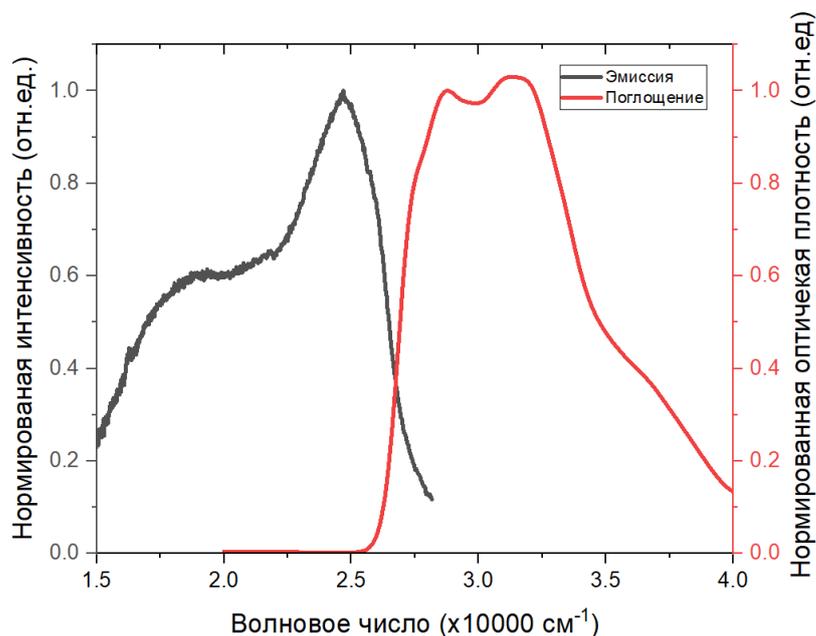


Рис. 1. Нормированные спектры оптического поглощения (красная линия) и люминесценции (черная линия) в энергетическом представлении. Положение абсциссы точки пересечения графиков определяет значение энергии 0–0 фононного перехода

Литература

1. *Bünzli J.-C.G.* On the design of highly luminescent lanthanide complexes // *Coordination Chemistry Reviews*. 2015. V. 293–294. P. 19–47.
2. *Bünzli J.-C.G.* Lanthanide light for biology and medical diagnosis // *Journal of Luminescence*. 2016. V. 170. Part 3. P. 866–878.
3. *Mettlin M.T. et al.* Bright Yb³⁺ complexes for efficient pure near-infrared OLEDs // *Dyes and Pigments* 2021 V. 195. P. 109701.

Исследование микроструктуры лазерной керамики на основе Yb:YAG, Yb:LuAG, Pr:LuAG – возможности методов

К.Н. Белов¹, Л.И. Дёмина¹, Д.А. Жеребцов², М.Г. Иванов², Н.Д. Кундикова^{1,2}

1Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)
2Институт электрофизики УрО РАН

Эффективность генерации лазерного излучения в оптической керамике зависит от дефектов и от технологического процесса на разных этапах её синтеза. Светорассеяние в лазерной керамике зависит от среднего размера зерна поликристаллической структуры. Размер кристаллитов зависит от технологии изготовления керамики.

Для определения микроструктуры оптической лазерной керамики, в работе [1] предложен метод комбинационного рассеяния света, сканирующей электронной и оптической микроскопии [2], для алюмо-иттриевого граната, допированного ионами неодима (1at%Nd:YAG).

Цель настоящей работы – определение структуры лазерной керамики 3at%Yb:LuAG, 3at%Yb:YAG, 0.5at% Pr:LuAG.

Лазерная керамика Yb:LuAG обладает некоторыми преимуществами, в том числе более высокой теплопроводностью, по сравнению с керамикой Nd:YAG. Спектры комбинационного рассеяния регистрировались на спектрометре комбинационного рассеяния ЗНЛ ИНТЕГРА СПЕКТРА на длине волны 633 нм, СЕМ-изображения на сканирующем электронном микроскопе JOEL JSM- 7001F OXFORD INSTRUMENTS, изображения в оптическом микроскопе OLYMPUS BX35P.

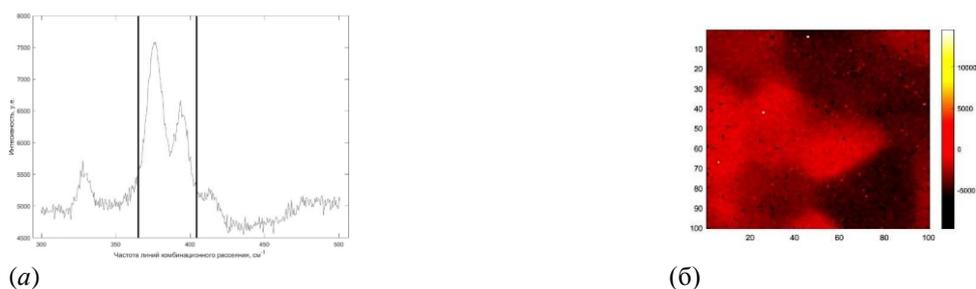


Рис. 1. Спектры комбинационного рассеяния керамики 3at%Yb:LuAG: (а) локальный спектр в диапазоне от 300см^{-1} до 500см^{-1} , (б) изображение, полученное после анализа пиков по значениям центра-масс интенсивности в спектрах комбинационного рассеяния поверхности 3at%Yb:LuAG размером $85 \times 85\text{ мкм}$

На рис. 1 (а) представлен спектр комбинационного рассеяния керамики 3at%Yb:LuAG. Вертикальными линиями выделен спектральный диапазон от 365 см^{-1} до 405 см^{-1} . В этом диапазоне располагаются два пика, которые нужно анализировать по значениям центра-масс интенсивности после получения множества спектров на заданной поверхности.

Пространственное распределение интенсивности получено на четырёх участках поверхности исследуемого образца. На рис. 1 (б) изображено одно из четырёх пространственных зависимостей значения центра-масс интенсивности рассматриваемых двух пиков. Контрастные пятна, наблюдаемые на рисунке, соответствуют разным зёрнам и иллюстрируют поликристаллическую структуру лазерной керамики. Проявление светлых и тёмных пятен связано с различными значениями центра-масс интенсивности указанных пиков в спектрах комбинационного рассеяния, полученных на поверхностях разных зёрен.

Таким образом, методом комбинационного рассеяния показано, что средний размер зёрен лазерной керамики 3at%Yb:LuAG составляет примерно 20 мкм , в различных зёрнах наблюдается сегрегация легирующей смеси.

Методами комбинационного рассеяния и электронной микроскопии показано наличие сегрегации внутри различных зёрен, на границах зёрен сегрегации не обнаружено; все 3 метода показала, что средний размер зёрен лазерной керамики 3at%Yb:YAG примерно 40 мкм .

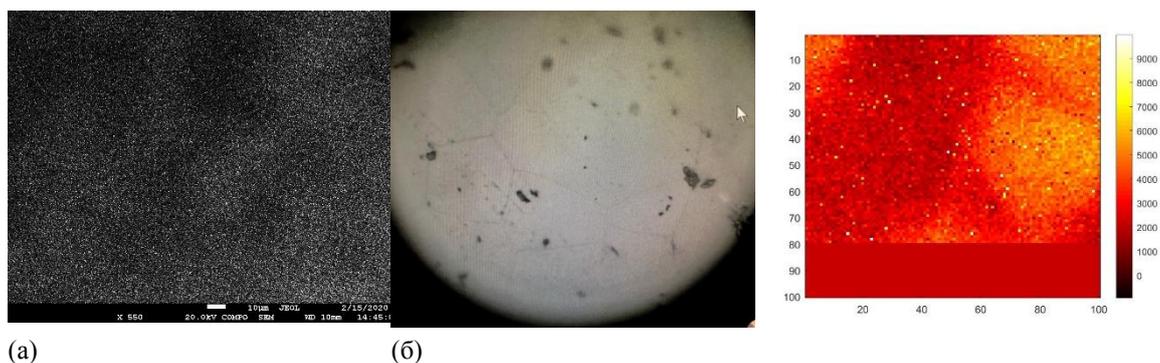


Рис. 2. Изображения поверхности керамики 3at%Yb:YAG: (а) СЕМ-изображение при увеличении в 550 раз, 20В, (б)изображение, полученное с помощью оптического микроскопа при увеличении в 300 раз, (в) изображение, полученное после анализа пиков по значениям центра-масс интенсивности в спектрах комбинационного рассеяния в интервале $362\text{--}406\text{ м}^{-1}$ с поверхности 3at%Yb:YAG размером $85\text{*}85\text{ мкм}$

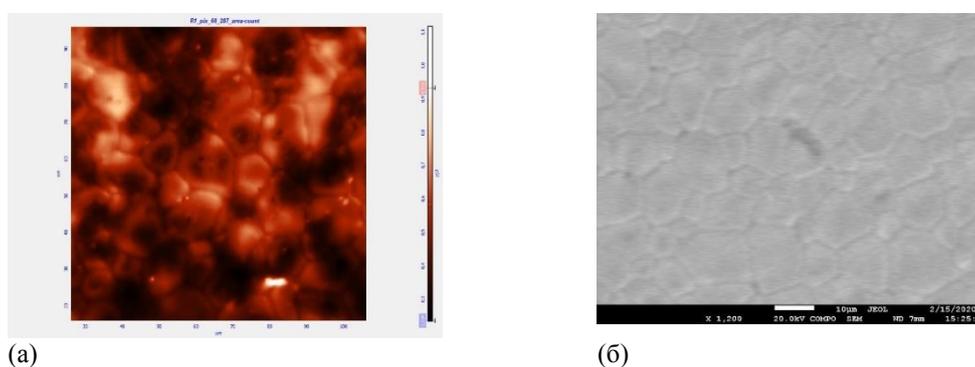


Рис. 3. (а) Изображение комбинационного рассеяния керамики 0,5Pr:LuAG: в диапазоне от 0 см^{-1} до 1000 см^{-1} размером $85\text{*}85\text{ мкм}$, (б) изображение поверхности керамики 0,5Pr:LuAG, полученное с помощью СЕМ при 20В, увеличение в 1200 раз



Рис. 4. Изображения поверхности керамики 0,5Pr:LuAG: (а) при увеличении в 300 раз, (б) при увеличении в 100 раз

Все три метода позволяют увидеть кристаллиты, их средний размер около 10 мкм . Спектроскопия комбинационного рассеяния и электронная микроскопия показывают, что интенсивность рассеяния на зёрнах меньше, чем на их гранях.

Литература

1. Ramirez MO. et al. // Opt. Express. 2008. V. 16, N 9. P. 5965.
2. Fu, Y. et al. Fabrication, microstructure and laser performance of composite Nd:YAG transparent ceramics // Opt. Mater. (Amst). 71, 90–97 (2017).

Нанопериодические оптические сенсоры с гигантским усилением Рамановского рассеяния света при ИК-возбуждении

А.С. Астраханцева^{1,2}, И.В. Кукушкин²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт физики твердого тела РАН

В настоящее время во всем мире наблюдается стремительная динамика развития SERS-методов (SERS – surface-enhanced Raman scattering) для детектирования химических или биологических субстанций в следовых количествах [1]. В связи с этим проблема усиления локального электромагнитного поля вблизи границы раздела наноструктурированных металлических и диэлектрических слоев имеет принципиально важное значение. Следует отметить, что в видимом диапазоне частот методы управления контурами плазмонного поглощения позволяют достигать усиления интенсивности Рамановского рассеяния света в десятки миллионов раз [2, 3]. Однако кроме сигнала Рамановского рассеяния в этом спектральном диапазоне усиливается и фотолюминесценция, которая затрудняет детекцию SERS-сигнала. Решением этой проблемы является переход на более низкочастотные лазерные источники света. Кроме того, в ИК-диапазоне уменьшается затухание плазменных волн в серебре [4], что приводит к увеличению их параметра добротности. Хорошо известно [4], что при увеличении длины волны лазерного излучения от 500 до 1500 нм добротность плазменных волн в серебре изменяется на порядок, что компенсирует потери в интенсивности объемного Рамановского рассеяния (интенсивность Рамановского рассеяния пропорциональна четвертой степени частоты возбуждения). Таким образом, усиление в ИК-области может быть значительно больше, чем в видимой области спектра.

В настоящей работе использовалось лазерное излучение с длинами волн 785 и 1064 нм, и изучались зависимости коэффициента усиления интенсивности Рамановского рассеяния света от геометрии (высоты, планарных размеров, форм и зазоров) диэлектрических столбиков SiO₂ в периодических структурах, а также от толщины серебряного слоя. С помощью методов электронной литографии и плазмохимического травления изготавливались периодические диэлектрические структуры с квадратными, круглыми, прямоугольными и треугольными столбиками (рис. 1). Их планарный размер изменялся в диапазоне 400–600 нм для лазера с длиной волны 1064 нм и 300–500 нм для лазера с длиной волны 785 нм, зазор между ними – в диапазоне 400–600 нм, высота столбиков принимала значения 50 нм, 250 нм и 1000 нм. Затем с помощью установки вакуумного термического напыления поверх изготовленных диэлектрических структур наносился толстый слой серебра. Толщина серебра принимала значения 40 нм, 120 нм и 200 нм. Исследования по пространственному распределению интенсивности SERS на изготовленных структурах проводились с помощью оптического сканирующего микроскопа Olympus BX51 на базе Рамановских спектрометров EnSpectr R785 (мощность излучения составляла 100 мВт) и EnSpectr R1064 (мощность излучения составляла 100 мВт). Диаметр пятна сфокусированного лазерного луча для обоих спектрометров составлял 10 мкм, шаг сканирования при этом также составлял 10 мкм.

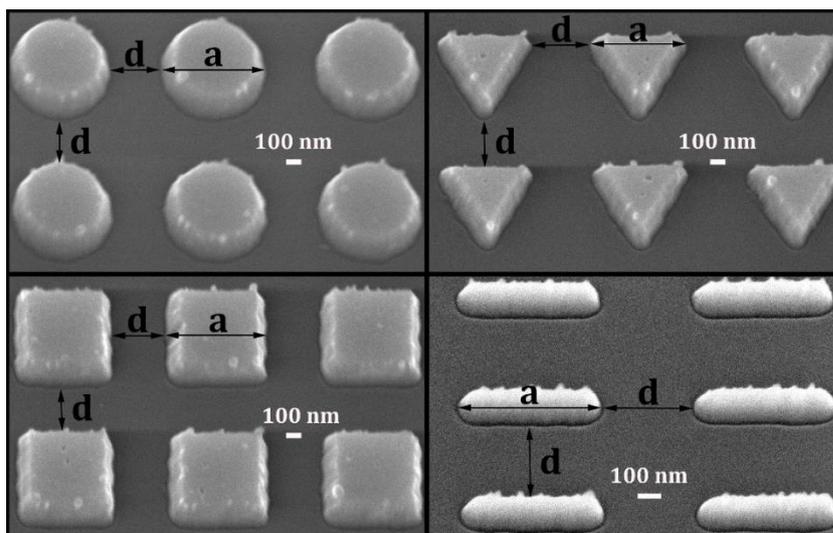


Рис. 1. Фотографии структур с различными формами диэлектрических наностолбиков, полученные на сканирующем электронном микроскопе

С целью гигантского усиления сигнала Рамановского рассеяния света были разработаны наноструктуры типа «фотонный кристалл», представляющие собой периодический массив диэлектрических столбиков из SiO₂, покрытый толстым слоем металла. В данном исследовании было показано, что в ближней ИК-области спектра

могут быть достигнуты рекордно большие коэффициенты усиления Рамановского рассеяния света (более чем на восемь порядков), что связано с высокой добротностью плазменных волн в серебре при этих частотах. Установлено, что вклад в эффект SERS в ближней ИК-области кроме плазмонного резонанса обеспечивает геометрический резонанс, возникающий при согласовании размеров диэлектрической структуры и длины волны лазерного излучения. Продемонстрирована возможность плавной подстройки резонанса плазмонного поглощения комбинированной металл-диэлектрической структуры под длины волн лазерного излучения 785 и 1064 нм.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-04-60077).

Литература

1. *Ambartsumyan O., Gribanyov D., Kukushkin V. et al // Int. J. Mol. Sci., V. 21, P. 3373 (2020).*
2. *Fleischmann M., Hendra P. J., and McQuillan A.J // Chem. Phys. Lett., V. 26(2), P. 163–166 (1974).*
3. *Homola J., Surface Plasmon Resonance Based Sensors // Berlin: Springer (2006).*
4. *Johnson P. B. and Christy R.W // Phys. Rev. B, V. 6, P. 4370 (1972).*

УДК 535.36

Оптическая микроскопия и спектроскопия наночастиц LaF_3 , допированных ионами Nd^{3+} , в водных средах

Г.О. Силаев^{1,2}, Орловский Ю.В.³, Ф.В. Верецагин¹, Ю.Г. Вайнер^{1,2}

¹Институт спектроскопии РАН

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

³Научный центр лазерных материалов и технологий ИОФАН

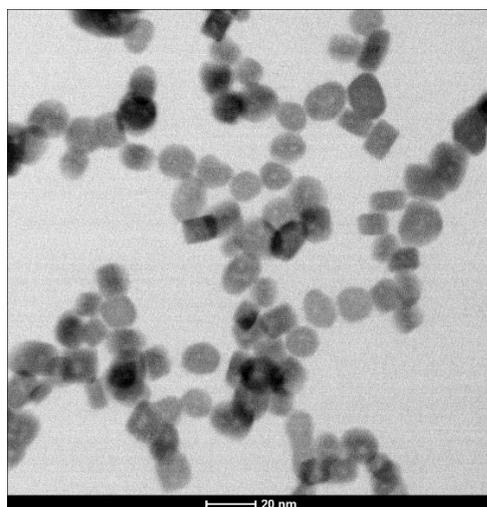
Одной из проблем диагностики биологических тканей методами оптической микроскопии является их малая прозрачность и низкая контрастность. Одним из наиболее перспективных направлений в этой области является введение в наблюдаемые ткани флуоресцентных меток и использование для зондирования длин волн ближнего инфракрасного (БИК) диапазона (так называемых окон прозрачности), характеризующихся минимальным поглощением света. В качестве таких меток (называемых биомаркерами) используют, флуоресцентные молекулы, флуоресцирующие и плазмонные наночастицы, которые избирательно усиливают свечение от тех компонент биоструктуры, в которые они попадают, а также апконвертирующие наночастицы, которые светятся в БИК диапазоне при облучении на более длинных волнах. Существующие в настоящее время биомаркеры обладают рядом принципиальных недостатков. Это низкий уровень фотосвечения, сильное нежелательное воздействие на ткани, низкая фотоустойчивость, быстрое разрушение или удаление из изучаемого объема самими тканями, а в ряде случаев недостаточно малые размеры. Поэтому проблема создания эффективных биомаркеров, характеризующихся высокими фотостабильностью и яркостью в окнах прозрачности тканей, не оказывающих вредное воздействие на изучаемые объекты и обладающих малыми размерами является актуальной проблемой современной физики.

Данная работа посвящена изучению одиночных наночастиц фторида лантана, допированных ионами неодима: $\text{LaF}_3:\text{Nd}^{3+}$, методами оптической микроскопии и спектроскопии. Указанные наночастицы удовлетворяют большинству требований к эффективным биомаркерам, в частности, они являются перспективными кандидатами для использования в целях фототермической терапии опухолей [1]. Помимо отсутствия нежелательного воздействия на ткани и высокой фотоустойчивости, нанокристаллы $\text{LaF}_3:\text{Nd}^{3+}$, обладают рядом других принципиальных преимуществ. Так, например, в отличие от апконвертирующих наночастиц, которые являются альтернативными кандидатами для фототермической терапии, имеющих характерные размеры порядка 200 нм, наночастицы $\text{LaF}_3:\text{Nd}^{3+}$ характеризуются существенно меньшими размерами (до 10 нм в диаметре). На рис. 1 приведен пример микрофотографии наночастиц $\text{LaF}_3:\text{Nd}^{3+}$, полученной с помощью просвечивающего электронного микроскопа, и соответствующее распределение таких частиц по размерам, рассчитанное по измеренным микрофотографиям.

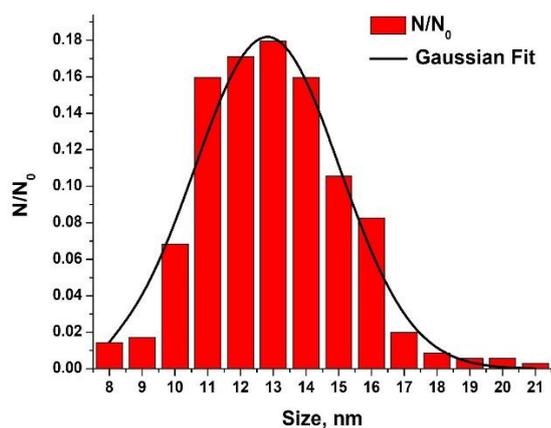
Существенно, что спектральные пики люминесцентного свечения изучаемых наночастиц находятся в областях наибольшей прозрачности тканей – биологических окнах (650–950 нм и 1000–1350 нм), что позволяет минимизировать потери, связанные с ослаблением излучения внутри тканей. К сожалению, упомянутые наночастицы фторида лантана характеризуются низкой яркостью свечения, что делает актуальными разработку частиц с более высоким уровнем свечения и дальнейшие исследования их свойств.

В ходе работы были получены данные о размерах нанокристаллов $\text{LaF}_3:\text{Nd}^{3+}$, измеренные с применением микроскопа «светового листа», путем анализа траекторий их броуновского движения в воде (метод NTA), а также методом динамического рассеяния света (DLS), также в водной среде. Кроме того, размеры наночастиц определялись независимо, путем одновременного измерения сигналов упруго рассеянного от них света и сигналов релеевского рассеяния воды. Результаты этих измерений хорошо совпадали. В то же время, результаты измерения размеров наночастиц оптическими методами, в водной среде, и с применением электронного микроскопа, на

сухой микросетке, заметно отличались. Был сделано предположение, о возможной агрегации изучаемых наночастиц в «цепочки». Обсуждаются результаты измерения спектров люминесценции изучаемых наночастиц. Проведенные исследования показывают перспективность использования методов высокочувствительной оптической микроскопии для оперативной диагностики наночастиц разной природы.



(а)



(б)

Рис. 1. а) Пример изображений нанокристаллов $\text{LaF}_3:\text{Nd}^{3+}$ полученных с помощью просвечивающего электронного микроскопа, б) распределение нанокристаллов $\text{LaF}_3:\text{Nd}^{3+}$ по размерам

Литература

1. *Uéslen Rocha, Jie Hu, Emma Martín Rodríguez, Alexander S. Vanetsev, Mikkel Råhn, Väino Sammelselg, Yurii V. Orlovskii, José García Solé, Daniel Jaque, Dirk H. Orthgies*, Subtissue Imaging and Thermal Monitoring of Gold Nanorods through Joined Encapsulation with Nd-Doped Infrared-Emitting Nanoparticles. DOI:10.1002/sml.201600866.

Секция общей физики

УДК 621.3.09

Разработка технологий оружия направленной энергии за рубежом

А.В. Кубышкин¹, И.Н. Белоконов²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова (ФГУП ВНИИА)

Пентагон и военные ведомства других ведущих зарубежных государств осуществляют широкомасштабные НИОКР в области оружия направленной энергии (ОНЭ) [1, 2]. Несмотря на то, что массогабаритные характеристики и уровень энергопотребления стратегического ОНЭ остаются критичными для принятия этих систем на вооружение, работы в этом направлении продолжают Агентством ПРО, а также видами вооруженных сил (ВМС, СВ и ВВС) [3].

Наиболее близким по технической готовности считается применение ОНЭ прикрытия огневых средств быстрого глобального удара, в т.ч., гиперзвуковых, от массированных атак беспилотных летательных аппаратов, как кустарного производства, так и технически совершенных, с повышенными уровнями стойкости [4–6].

Кроме собственно оружия, на современном этапе высокоэнергетические лазеры рассматриваются зарубежными военными специалистами в качестве зондирующих элементов информационного обеспечения традиционных огневых комплексов. В особенности это касается таких стратегических систем как национальная ПРО США и объединенная войсковая ПРО-ПВО стран НАТО [7].

Посредниками в этих проектах часто выступают «оружейные» лаборатории министерства энергетики США (Лос-Аламосская, Ливерморская и «Сандия»). Они определяют перспективные направления исследований, участвуют в испытаниях демонстрационных образцов, а также отрабатывают на своих моделирующих установках критические узлы и технологии, в частности, подтверждая требования по электромагнитной совместимости, радиационной и ЭМИ стойкости, а также надежности при одновременном воздействии ряда неблагоприятных для эксплуатации факторов естественного и искусственного происхождения.

Следует отметить, что, несмотря на разнообразие заказчиков и посредников указанных технологических проектов, конечными разработчиками комплексов оружия выступают одни и те же американские фирмы (Northrop Grumman, Raytheon, General Atomics и Lockheed Martin), а испытываются разрабатываемые ими образцы на одних и тех же ракетных полигонах США и НАТО. Это позволяет трактовать рассмотренные ниже технологические проекты в совокупности как единую программу создания оружия направленной энергии.

По результатам натурных экспериментов на лазерных полигонах США выяснено, что поражение аэродинамических целей различного типа при мощности излучения 10-50 кВт осуществляется на предельных дальностях до 10 км. Более мощные системы должны основываться на новых, прорывных технологиях. В частности, платформой для перспективного лазерного излучателя со средней мощностью 100 кВт и более может стать двухфюзеляжный стратосферный носитель тяжелого класса.

В целом в области ОНЭ ежегодные расходы Пентагона составляют около 2 млрд. долл. в год по всем видам вооруженных сил и управлениям центрального подчинения. Это позволяет создать широкую и прочную технологическую основу для появления в ближайшей и среднесрочной перспективе лазерного, радиочастотного и кинетического оружия, дополняющего традиционные огневые средства ПРО-ПВО. На более отдаленную перспективу можно прогнозировать появление более мощных излучателей для решения широкого круга задач стратегического уровня.

Литература

1. Развитие за рубежом лазерных комплексов ПРО и ПВО // Зарубежное военное обозрение № 1 (886), 2021. С.56–63.
2. Разработка в США средств поражения малоразмерных беспилотных летательных аппаратов // Зарубежное военное обозрение № 8 (893), 2021. С.50–53.
3. RDT&E PROGRAMS (R-1) Department of Defense Budget Fiscal Year 2022. Office of the Under Secretary of Defense (Comptroller). May 2021. 108 P.
4. Presentation of LTG Neil Thurgood, Chief of the Army Rapid Capabilities and Critical Technologies Office to Space and Missile Defense Symposium. August 11, 2021. 13 P.
5. Navy Lasers, Railgun, and Gun-Launched Guided Projectile: Background and Issues for Congress. Congressional Research Service Report R44175 for Members and Committees of Congress. August 2, 2021. 41 P.
6. Department of Defense Counter-Unmanned Aircraft Systems. CRS Document IF11426. June 7, 2021. 3 P.
7. Defense Science and Technology: Opportunities to Better Integrate Industry Independent Research and Development into DOD Planning. Report GAO-20-578 to Congressional Committees. September 2020. 58 P.

Гамма-резонансный спектрометр на наклонном канале реактора ПИК

М.В. Ремизов, Д.И. Богмут, В.Т.Лебедев

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова
НИЦ «Курчатовский институт»

Актуальные проблемы развития гамма-резонансной спектрометрии для расширения разнообразия мессбаэровских ядер для широкого применения в физических, химических, геологических, биологических исследованиях и исследованиях в области материаловедения делают чрезвычайно важным использование нейтронного возбуждения гамма-источников в пучке короткого времени распада, которое компенсируется их непрерывным облучением в каналах реактора [1]. В текущем году запуск реактора ПИК с планируемой высокой плотностью потока нейтронов в активной зоне (10^{15} н/с·см²) ставит задачи скорейшего оснащения каналов современными ядерно-физическими установками не только традиционными для реакторов такого класса, но и оригинальными приборами, существенно расширяющими область применений нейтронов в научных, технических и промышленных направлениях для зондирования структуры и анализа физико-химических свойств активно разрабатываемых новых наноматериалов, в первую очередь углеродных (наноалмазов, фуллеренов, нанотрубок и производных), востребованных в электронике и оптоэлектронике, технологиях катализа и биомедицины. В зале наклонных каналов реактора ПИК (рис. 1) создается комплекс новых приборов для целей гамма-спектроскопии и флуоресцентного анализа элементного состава различных образцов, как природных, так и искусственно синтезированных в последнее время (эндофуллерены редкоземельных и переходных металлов, актиноидов, металлонитридов и др.).



Рис. 1. Зал наклонных каналов реактора ПИК, показаны шиберы в откатной защите на выходе каналов для размещения ядерно-физических установок

Спектрометр с нейтронной накачкой источника гамма-излучения (рис. 2) позволит исследовать образцы, имеющие в составе большинство известных мессбаэровских ядер. Нейтронные исследования по физике и химии конденсированного состояния, геологии, металлургии, наноматериалам будут сочетаться с анализом состояния мессбаэровских ядер в образцах и координации окружающих атомов, создающих электрические и магнитные поля на ядрах, что задает тонкую структуру регистрируемых спектров в зависимости от температуры и внешнего поля. Комбинация приборов упругого (неупругого) рассеяния нейтронов и гамма-резонансной спектрометрии обеспечит наиболее полную информацию об изучаемых объектах и системах.

В 2020 году в итоге совместной работы с Санкт-Петербургским государственным университетом (проф. В.Г. Семенов) введен в эксплуатацию прототип спектрометра – установка электродинамического типа (рис. 3), на которой тестировали Fe-интеркалированные графены [2], эндофуллерены [3], наноалмазы, легированные ионами Eu [4].

В настоящее время ведется компьютерное моделирование полномасштабного спектрометра с возможностями автоматической замены образцов, в том числе облученных в активной зоне реактора до высоких флюенсов (10^{20} н/см²).

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (гр, № 18-29-19008).

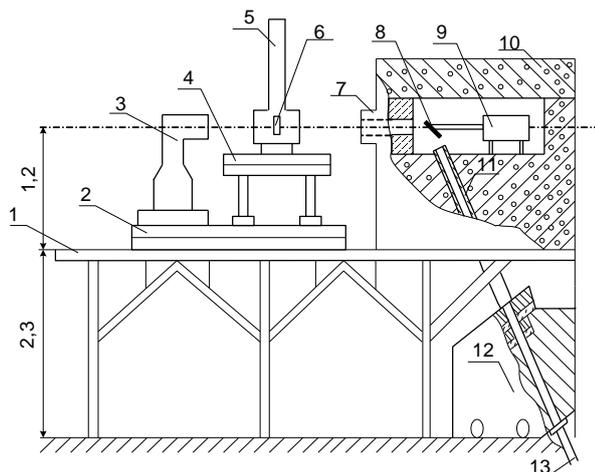


Рис. 2. Гамма-резонансный спектрометр на наклонном канале реактора ПИК: 1 – платформа; 2 – рама для гашения колебаний; 3 – детектор; 4 – юстировочная платформа; 5 – рефрижератор; 6 – образец; 7 – коллиматор; 8 – гамма-источник; 9 – доплеровский модулятор; 10 – экран; 11 – нейтронвод; 12 – секционный шибер; 13 – наклонный нейтронный канал

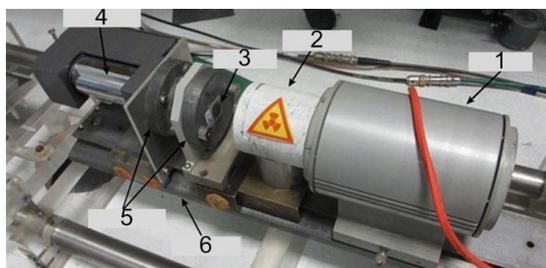


Рис. 3. Общий вид установки-прототипа: 1 – источник гамма-излучения на вибрирующем основании, 2 – радиационная защита, 3 – образец, 4 – фотоумножитель, 5 – коллиматоры, 6 – оптическая скамья

Литература

1. Lázár I., Szilágyi A., Sáfrán G., Szegedi Á., Stichleutner S., Lázár K. Iron oxyhydroxide aerogels and xerogels by controlled hydrolysis of $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ in organic solvents: stages of formation, // RSC Advances. 2015. V. 5. P. 72716.
2. Камзин А.С., Обайдат И.М., Козлов В.С., Воронина Е.В., Narayanaswamy V., Al-Omari I.A. Нанокompозиты оксид графена/оксид железа (GrO/FeOx) для биомедицины: синтез и исследования. Физика твердого тела, 2021, Т. 63, вып. 6, С. 807.
3. Черепанов В.М., Лебедев В.Т., Борисенкова А.А., Фомин Э.В., Артемьев А.Н., Беляев А.Д., Князев Г.А., Юренин А.Ю., Чуев М.А. Валентность и координация железа с углеродом в структурах на основе фуллерена C_{60} по данным ЯГР-спектроскопии и EXAFS // Кристаллография. 2020. Т.65, № 3. С.420–424.
4. Kulvelis Yu., Lebedev V., Yudina E., Shvidchenko A., Aleksenskii A., Vul A., Kuklin A. Structural Studies of Detonation Nanodiamonds with Grafted Metal Ions by Small-Angle Neutron Scattering // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2020. V. 14. Suppl. 1. P. S132–S133. © Pleiades Publishing, Ltd. 2020.

УДК 621.311

Определение эффективности процесса нагрева воды экспериментальным методом

И.А. Щинников

Государственный аграрный университет Северного Зауралья

Рассмотрен процесс нагрева воды в зависимости от разных характеристик питающей сети и влияния температуры окружающего воздуха на продолжительность процесса. Первоначально был произведен теоретический расчет для идеальных условий относительно которого в дальнейшем сравнивались полученные показатели. Целью данной работы является описание результатов эксперимента по определению показателя эффективности процесса нагрева при помощи универсальной энергетической диаграммы.

В энерготехнологическом процессе нагрева воды, был использован нагревательный элемент номинальной мощностью – $P_n = 1,85$ кВт; номинальное напряжение питающей сети – $U_{ном} = 220$ В; объем нагреваемой

воды составляет 1 литр. Заданы в эксперименте технологические условия: начальная температура воды $T_n=20\text{ }^\circ\text{C}$, необходимая температура нагрева $T_k=60\text{ }^\circ\text{C}$ ($\Delta T=40\text{ }^\circ\text{C}$).

Первая серия экспериментов - исследование влияния температуры окружающей среды при номинальном значении напряжения сети: эксперимент № 1.1 – $T_{окр}=24\text{ }^\circ\text{C}$; эксперимент № 1.2– $T_{окр}=1\text{ }^\circ\text{C}$.

В представленных диаграммах присутствует теоретический контур, обозначенный цифрой 1, данные для построения которого рассчитываются по следующим формулам:

Минимальное количество энергии, гарантирующее получение заданного результата:

$$Q_{теор}=Q^{уд}*(T_k-T_n),$$

где $Q^{уд}$ – удельная энергоёмкость нагрева воды, $\text{кДж}/^\circ\text{C}$, T_n и T_k – начальная и конечная температуры нагрева, $^\circ\text{C}$;

$$Q^{уд}=c*m,$$

где c – удельная теплоёмкость воды, $\text{кДж}/\text{кг }^\circ\text{C}$, m – масса воды, кг .

Время нагрева определяется по номинальной мощности нагревателя:

$$t_T=Q_{теор}/P_n.$$

Таблица 1. Исходные данные первого опыта

№	$T_{окр},\text{ }^\circ\text{C}$	$Q, \text{кДж}$	$t, \text{с}$	$Q_э$
Теория	6/26	168	90,81	1
1.1	26	240,5	130	1,431
1.2	6	286,75	155	1,707

Таблица 2. Показатели энергоэффективности нагрева воды в первом опыте

№	$T_{окр},\text{ }^\circ\text{C}$	$\Delta Q, \text{кДж}$	$\Delta t, \text{с}$	α	$P_{ср}, \text{кВт}$	β	$\Delta T\text{ }^\circ\text{C}/\text{сек}$	γ	$Q_э$
Теория	6/26	-	-	62	1,85	24	-	77	1
2	26	72,5	39,19			17	0,31	81	1,431
3	6	118,75	64,19			14	0,26	82	1,707

Выводы по первой серии экспериментов: при $T_{окр}=6\text{ }^\circ\text{C}$ относительная энергоёмкость увеличилась на 70,7%, скорость нагрева снизилась на 41%, время процесса увеличилось на 70,7% относительно теоретических значений. При $T_{окр}=26\text{ }^\circ\text{C}$ относительная энергоёмкость увеличилась на 43,1%, скорость нагрева снизилась на 30%, время процесса увеличилось на 43,1% относительно теоретических значений.

Вторая серия экспериментов - исследование влияния напряжения сети при постоянной температуре окружающей среды $T_{окр}=25\text{ }^\circ\text{C}$.

Таблица 3. Результаты второго опыта

№	$U, \text{В}$	$I, \text{А}$	$P, \text{кВт}$	$Q, \text{кДж}$	$t, \text{с}$	$Q_э^Q$
2.2	219	7,8	1,7	226,1	133	1,35
2.3	200	7,5	1,5	228	152	1,36

Таблица 4. Показатели энергоэффективности второго опыта

	$t, \text{с}$	$\Delta Q, \text{кДж}$	$\Delta t, \text{с}$	α	$P_{ср}, \text{кВт}$	β	$\Delta T\text{ }^\circ\text{C}/\text{сек}$	γ	$Q_э$
Теория	90,81	-	-	62	1,85	24	0,44	77	1
Номинал	133	58,1	42,19	60	1,7	17	0,3	80	1,35
0,9	152	60	61,19	56	1,5	15	0,26	80	1,36

Выводы по второй серии экспериментов: при номинальном значении напряжения питающей сети, относительная энергоёмкость процесса повышается на 35%, время процесса нагрева увеличивается на 46,5% относительно теории. При снижении напряжения питающей сети нагревателя на 10% (0,9ином) относительная энергоёмкость процесса повышается на 36%, время процесса нагрева увеличивается на 67,4% относительно теории.

При $U_{ном}$ и $0,9 U_{ном}$ затрачивается на нагрев воды примерно та же тепловая энергия (разница в 1%), но при этом время нагрева увеличивается на 14,3%. При $U_{ном}$ затрачивается $0,0628\text{ кВт}\cdot\text{ч}$ электрической энергии,

а при 0,9 Уном затрачивается 0,0633 кВт*ч электрической энергии. Вернувшись к предыдущему выводу, получаем тот же итог что при примерно равной энергии время процесса увеличивается при снижении мощности нагревательного элемента.

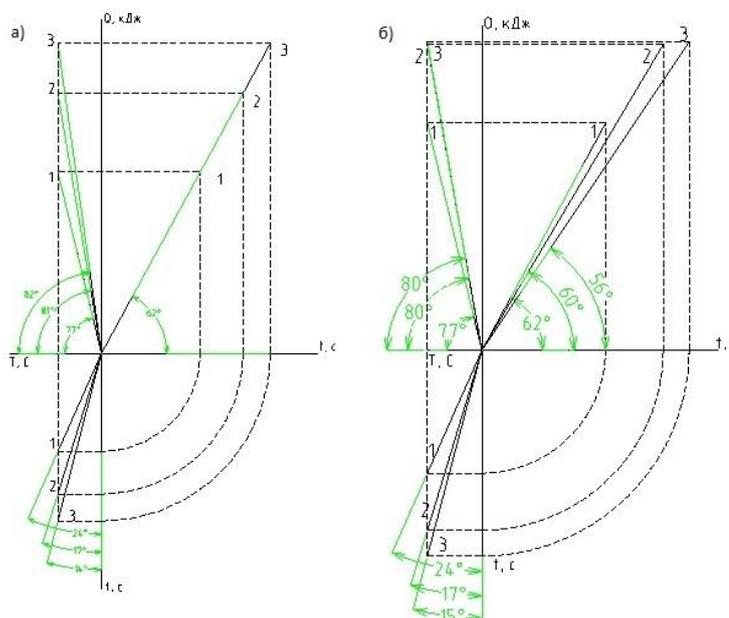


Рис. 1. Диаграмма энергетической эффективности: а) первого опыта; б) второго опыта

Литература

1. Гордеев А.С. Энергосбережение в сельском хозяйстве: учебное пособие / А.С. Гордеев, Д.Д. Огородников, И.В. Юдаев. СПб.: Издательство «Лань», 2014. 400. С.
2. Карпов В.Н., Юлдашев З.Ш. Энергосбережение. Метод конечных отношений: Монография / СПбГАУ, 2010.
3. Карпов В.Н., Юлдашев З.Ш., Немцев А.А., Немцев И.А. Концепция оценки топливно-энергетической эффективности производства в АПК // Известия международной академии аграрно.

УДК 53.07

Ионный насос

А. Н. Синельников

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Для создания высокого вакуума используют высоковакуумные насосы, такие как: турбомолекулярный, паромасляный, магнитоэридный, которые дополнительно понижают давление, создаваемое форвакуумным насосом. У этих схем, однако, есть свои недостатки [1]: сложность исполнения ротора, загрязнение откачиваемого объема парами масла и ограниченный ресурс, особенно при низком вакууме. В данной работе я рассмотрел возможность создания модели ионного насоса, отличающейся от общей схемы магнитоэридного насоса, которая будет содержать достоинства существующих высоковакуумных насосов, и исключать их недостатки.

При протекании тока через остаточный газ, ионы и электроны взаимодействуют с молекулами газа, передавая им энергию и импульс. При движении в магнитном поле электроны и ионы приобретают импульс, направленный в одном направлении, который они могут передавать молекулам газа, тем самым изменяя их угловое распределение скоростей и вызывая откачку. При использовании магнетрона молекулы газа будут закручиваться вокруг оси разрядной камеры, и давление на периферии камеры будет большим, чем на оси, из-за сил инерции, в связи с чем, если создать подвод газа на оси магнетрона и отвод на периферии, можно проводить откачку.

В работе проведён расчёт протекания тока через магнетрон, наполненный газом в приближении сплошной среды. На основании расчёта была выбрана конструкция магнетрона, позволяющая создавать относительный перепад давления до 10 раз. Была изготовлена камера магнетрона, электромагнит и проведены испытания системы при различных токах магнетронного разряда и индукции магнитного поля. При давлении в магнетроне в 20 Па удалось создать разряжение в (0.6 ± 0.3) Па.

Литература

1. Ашкинази Л.А. Вакуум для науки и техники // М.: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. 128 с.

Система стабилизации температуры, основанная на эффекте Пельтье

А.С. Стрельников^{1,2}, Н.С. Пилюгин², Е.Д. Муханова^{1,2}, Д.О. Устимчук²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Сколковский институт науки и технологий

Проведена оптимизация системы контроля температуры, основанной на работе термоэлектрического элемента Пельтье [1, 2]. Рассматриваемая система представляет собой нагревательный элемент известной мощности, температуру которого необходимо поддерживать постоянной, на который крепится элемент Пельтье с системой контроля переносимого теплового потока, и, наконец, сверху крепится радиатор и вентилятор. Схема рассматриваемой системы представлена на рис. 1. В работе представлен анализ тепловых потоков системы и на его основе показан алгоритм быстрой стабилизации температуры элементом Пельтье при резком увеличении мощности нагревательного элемента.

Теоретическое исследование теплового тока в системе проводилось в следующих приближениях: теплоемкость самого элемента Пельтье считалась пренебрежимо малой, теплоотвод в окружающую среду происходит в основном через элемент Пельтье от радиатора, остальные потоки тепла пренебрежимо малы по сравнению с ними. Ниже приведены основные уравнения тепловых потоков:

$$Q_{in}(t) - Q_c(U(t), T_c(t), T_h(t)) - Q_{L_1}(T_c(t), T_0) = C_c \dot{T}_c(t), \quad (11)$$

$$Q_{L_1}(T_c(t), T_0) \approx \sigma_{L_1}(T_c - T_0) = Q_{in}, Q_c, \quad (12)$$

$$Q_h(U(t), T_c(t), T_h(t)) - Q_r(v_{flow}(t), T_h(t), T_f) - Q_{L_2}(T_h(t), T_0) = C_h \dot{T}_h(t), \quad (13)$$

$$Q_{L_2}(T_h(t), T_0) \approx \sigma_{L_2}(T_h - T_0) = Q_h, Q_r, \quad (14)$$

$$Q_h(U(t), T_c(t), T_h(t)) = Q_c(U(t), T_c(t), T_h(t)) + \frac{U^2(t)}{R_p}, \quad (15)$$

здесь $Q_{in}(t)$ – мощность нагревателя, температуру которого требуется поддерживать постоянной; Q_c, Q_h – поток тепла через холодную сторону элемента Пельтье, прилегающую к охлажденному телу с температурой T_c , и горячую сторону, прилегающую к радиатору и имеющую температуру T_h , Q_{L_1} – мощность утечек тепла в окружающую среду, имеющую температуру T_0 , σ_{L_1} – теплопроводность границы с окружающей средой; $R_p, U(t)$ – сопротивление элемента Пельтье и подаваемое на него напряжение. Мощность отвода тепла можно представить как

$$Q_r = \rho v_{flow} S c_{flow} (T_{flow,out} - T_{flow,in}), \quad (16)$$

$$Q_r \approx \frac{T_h - (T_{flow,in} + T_{flow,out}) / 2}{R_h}, \quad (17)$$

где $\rho, v_{flow}(t), S, c_{flow}$ – плотность, скорость, эффективное сечение потока и удельная теплоемкость жидкости или газа, отводящего тепло от радиатора, R_h – тепловое сопротивление радиатора, $T_{flow,i}$ – температура потока в различных точках. После преобразований получим в пределе $R_h \rightarrow 0$:

$$Q_r \approx \frac{2\rho v_{flow} S c_{flow}}{1 + 2\rho v_{flow} S c_{flow} R_h} (T_h - T_{flow,in}) \rightarrow \alpha v_{flow}(t) (T_h(t) - T_{flow,in}). \quad (18)$$

Ниже, на рис. 2, приведены экспериментальные данные для разных режимов работы элемента Пельтье. Из графика видно, что режим компенсации теплового потока (синяя линия), при котором $Q_{in} \approx Q_c \Leftrightarrow \dot{T}_c = 0$, позволяет поддерживать стабильную температуру и обеспечивает наименьшее время реакции на перегрев.

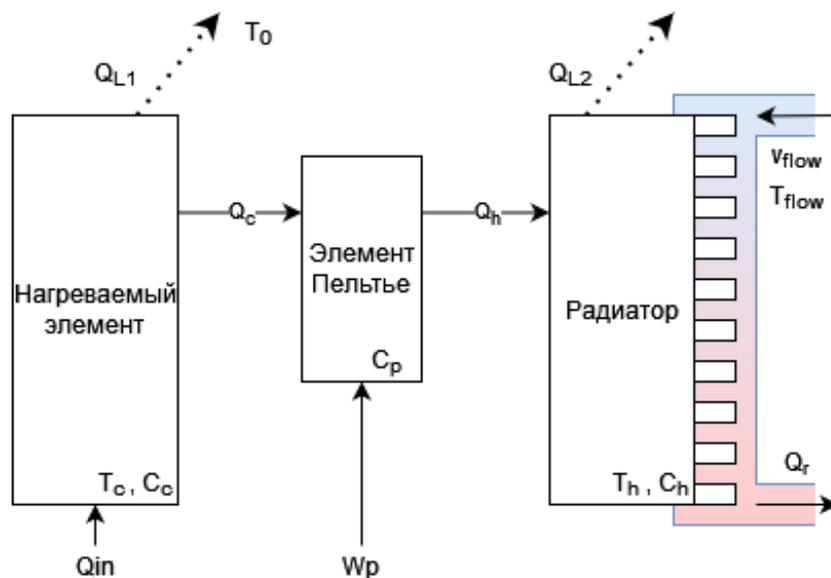


Рис. 1. Схема системы и тепловых потоков

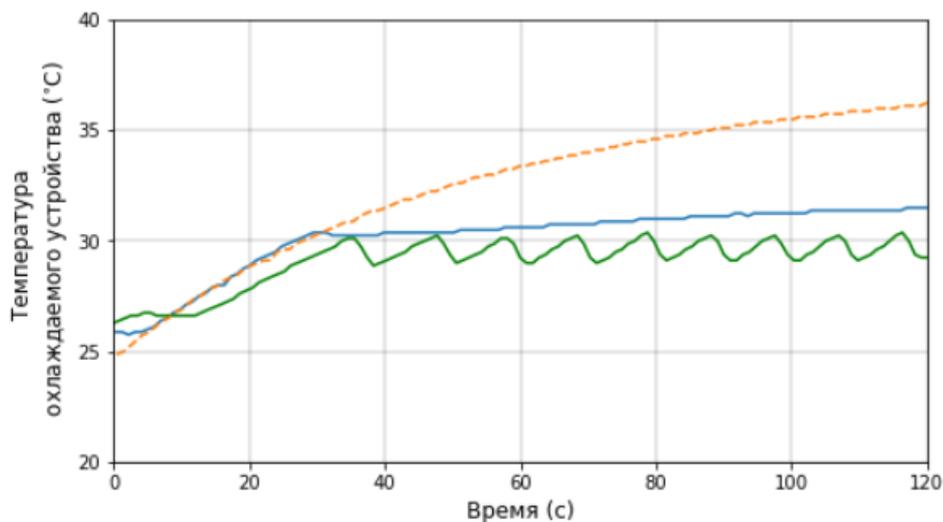


Рис. 2. Экспериментальные данные для разных режимов работы элемента Пельтье: оранжевая линия – нагрев с отключенным элементом Пельтье, синяя линия – режим компенсации теплового потока, зеленая линия – работа на максимальной мощности тепловой передачи через элемент Пельтье при превышении температуры в 30 °С (несбалансированное охлаждение)

Литература

1. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т. 3. Электричество. М.: Наука, 1977. 704 с.
2. Slanina Z., Uhlik M., Sladeczek V. Cooling Device with Peltier Element for Medical Application // IFAC-PapersOnLine, 51(6), 54–59. 2018.

Динамика распространения фронта сжатия при объемной детонации гомогенной стехиометрической смеси горючее – окислитель

М.В. Царьков, В.Ю. Стожков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящей работе рассчитываются характеристики, формируемой однородным сгоранием смесей горючее-окислитель ударной волны. Оценен радиус отрыва фронта сжатия, характерное время отрыва, отношение критического радиуса к начальному, энергия, передаваемая единице площади жестко закрепленной стены с заданной толщиной и модулем Юнга. Получена связь между вышеуказанными величинами и начальным размером области, занимаемой горючей смесью. Найдены расстояния с максимальным и минимальным потоками энергии. Исходя из полученных результатов представлена схема расположения зарядов в эксперименте по объединению сферических волн в цилиндрическую [1], а также предложена методика по обеспечению безопасности эксплуатации устройств, использующих горючие газы в качестве энергоносителей.

В рассматриваемой модели скорость полного протекания реакции в гремучей смеси принимается существенно большей скорости расширения. Тогда в первом приближении мы получаем изохорный нагрев продуктов реакции. При расширении продуктов реакции из состояния P_0, V_0 в случае, если скорость расширения будет больше скорости звука в окружающей среде, молекулы окружающего воздуха будут прижиматься к расширяющемуся газу до тех пор, пока скорость расширения не упадет до скорости звука. Как только это произойдет, «налипшие» на поверхность фронта ударной волны молекулы окружающего газа оторвутся от нее, таким образом произойдет переход от ударной волны к акустической.

Используя второй закон Ньютона $(P(V) - P_a)S = \frac{d\rho_a(V - V_0)v}{dt}$ и принимая $dV = Sdr$

$$\frac{dv}{dt} = \frac{dv}{dV} \frac{dV}{dr} \frac{dr}{dt} = \frac{dv}{dV} S v = \frac{1}{2} S \frac{dv^2}{dV},$$

где P, V – текущие давление и объем продуктов горения, P_a, V_0 – атмосферное давление и начальный объем гремучей смеси, S – текущая поверхность фронта ударной волны, ρ_a – плотность атмосферы, можно получить следующее соотношение $\frac{P(V) - P_a}{\rho_a} = v^2 + \frac{(V - V_0)}{2} \frac{dv^2}{dV}$ (1), v – скорость фронта ударной волны.

Используя уравнение адиабаты для продуктов горения $P(V) = P_0 \left(\frac{V_0}{V}\right)^\gamma$ из формулы (1) устанавливается связь скорости фронта ударной волны с параметрами среды:

$$v^2 = \frac{2P_0V_0^\gamma}{\rho_a(V - V_0)^2} \left(\frac{V^{2-\gamma}}{2-\gamma} - V_0 \frac{V^{1-\gamma}}{1-\gamma} + C \right) - \frac{P_a}{\rho_a} \quad (2),$$

$C = \frac{2P_0V_0^2}{(2-\gamma)(1-\gamma)}$ – константа, получаемая из условия сходимости тейлоровского разложения в области V_0 .

На рис. 1 приведены зависимости скорости ударной волны от расстояния от эпицентра взрыва для различных геометрий объема, содержащего гремучую смесь, рассчитанные по видоизмененной формулы (2):

$$v(r) = \sqrt{\frac{2P_0r_0^{s\gamma}}{\rho(r^s - r_0^s)^2} \left(\frac{r^{s(2-\gamma)}}{2-\gamma} - r_0 \frac{r^{s(1-\gamma)}}{1-\gamma} + \frac{r_0^{s(2-\gamma)}}{(2-\gamma)(1-\gamma)} \right) - \frac{P_a}{\rho}} \quad (3),$$

в которой $s=1$ для плоского слоя, $s=2$ – для цилиндрической и $s=3$ для сферической геометрий, r_0 – начальный характерный размер области горючей смеси. Критические радиусы, при достижении которых ударная волна переходит в акустическую, из формулы (3) представляются простым соотношением $r_{кр} = \sqrt[\chi]{r_0}$, где $\chi = 5,048$. При существовании препятствия, имеющего масштабированную геометрию исходной горючей области и обладающего с последней общим центром симметрии, для поглощенной энергии акустической волны справедливо следующая зависимость

$$E_{ак} = \alpha_{ак} E_{кин}(V_{кр}), \text{ где } E_{кин}(V) = \frac{1}{2} \rho_a (V - V_0) v^2(V),$$

$\alpha_{ак} = 4 \frac{\rho_a c_a \cdot \rho_c c_c}{(\rho_a c_a + \rho_c c_c)^2}$ – энергетический коэффициент прохождения акустической волны через границу воздух/

препятствие [2], ρ_a и c_a – плотность и скорость звука в воздухе, ρ_c и c_c – плотность и скорость звука в препятствии. Для ударной волны энергия, переданная препятствию, выражается следующим образом:

$$E_{y\partial}(V) = \frac{S(V)l_0}{2E} (P(V) - P_a)^2 + \alpha_{y\partial}(V) \frac{1}{2} \rho_a (V - V_0) v^2(V) \quad (4),$$

E, l_0 – модуль Юнга и толщина препятствия, $\alpha_{y\partial}$ –

суммарный энергетический коэффициент прохождения ударной волны. Энергетический коэффициент прохождения ударной волны выражается как $\alpha_{y\partial}(V) = \frac{\beta}{\alpha + \beta - \alpha\beta}$, а α и β – коэффициенты прохождения акустической

волны через границу раздела взрыв/ фронт и фронт/ препятствие соответственно, причем оба они зависят от плотности среды во фронте ударной волны, которая получена с использованием уравнения ударной адиабаты [3].

Итоговая поверхностная плотность энергии, передаваемая препятствию, зависит от расстояния от препятствия до эпицентра и дается выражением

$$\varepsilon(r) = \frac{E_{ном}(r) + \alpha_{y\partial} E_{кин}(r)}{S(r)}, r \leq r_{кр}; \quad \varepsilon(r) = \frac{E_{ак}}{S(r)}, r > r_{кр} \quad (5)$$

Для стехиометрической смеси пропан-воздух, занимающей шаровой объем радиусом 1 м, максимум передаваемой энергии соответствует расстоянию от препятствия до эпицентра взрыва 1,17 м, далее передаваемая плотность энергии резко падает с увеличением этого расстояния, и, более того, имеет разрыв на длине критического радиуса (рис. 2).

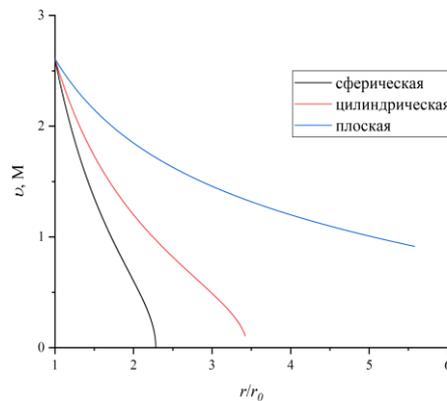


Рис. 1. Зависимость скорости фронта ударной волны в числах Маха от расстояния до эпицентра взрыва для различных геометрий гремучей смеси, смоделированная для стехиометрической смеси пропан-воздух

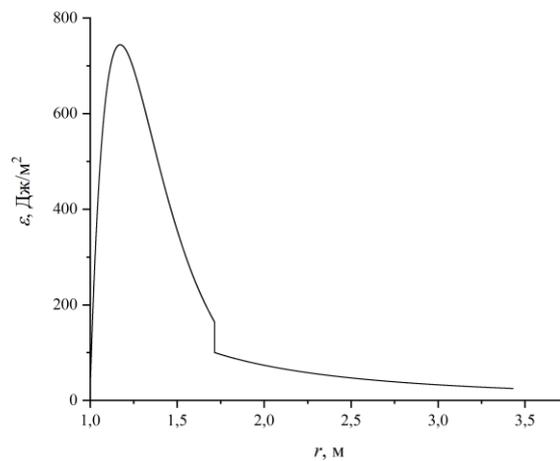


Рис. 2. Поверхностная плотность энергии, передаваемая препятствию сферической волной, возникающей при взрыве стехиометрической смеси пропан-воздух, $r_0=1$ м

Литература

1. Пинаев А.В. [и др.]. Структура ударных волн в ближней зоне при взрыве пространственных зарядов в воздухе // Прикладная механика и техническая физика. 2000. Т. 41, № 5, С. 81–90.
2. Ржевкин С.Н. Курс лекций по теории звука. М.: Издательство Московского Университета, 1960. 336 с.
3. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. 688 с.

УДК 532.5.032

Эффект Кэя как частный случай проявления свойств неньютоновских жидкостей

Д.Е. Вовк, И.М. Мазуренко

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рассмотрена математическая модель течения струи псевдопластичной жидкости в её неподвижном слое, на основании данной модели объяснён эффект Кэя – эффект возникновения «фонтана» при выливании псевдопластичной жидкости на плоскую поверхность. Исследована применимость данной модели на практике.

Модель основана на предположении о возникновении слоя с низкой вязкостью между слоями с большой разностью скоростей (рис. 1) Применимость модели была подтверждена двумя способами.

Первый заключался в теоретическом нахождении минимальной скорости, при которой может наблюдаться эффект Кэя, определения по ней минимальной высоты, с которой следует выливать жидкость, и сравнении её с экспериментально установленной высотой. Теоретически данная величина была найдена путём интегрирования дифференциального закона сохранения энергии. Изменение мощности кинетической энергии между двумя поперечными сечениями струи:

$$dE_{кин} = \frac{1}{2} \rho \pi R^2 [(V(x+dx))^2 - (V(x))^2] = \rho \pi R^2 V dV, \quad (1)$$

где ρ – массовый расход, $V(x)$ – скорость потока. Изменение мощности тепловых потерь между двумя поперечными сечениями струи:

$$dP_{mp} = V \tau dS = V \tau \pi R dx, \quad (2)$$

где τ – касательное напряжение, dS – площадь, а R – радиус поперечного сечения потока. Для оценки зависимости вязкости от градиента скорости была использована формула Кросса:

$$\eta(\dot{\gamma}) \approx \eta_\infty + \frac{\eta_0 - \eta_\infty}{1 + (\dot{\gamma} / \dot{\gamma}_c)^n}, \quad (3)$$

где $\dot{\gamma}$ – градиент скорости (в нашем эксперименте $\dot{\gamma} = V / \delta$, где δ – толщина слоя низкой вязкости), η_0 и η_∞ – вязкости при нулевом и стремящимся к бесконечности $\dot{\gamma}$, $\dot{\gamma}_c \approx 10 \text{ с}^{-1}$ – параметр.

Приравнявая $dE_{кин}$ к dP_{mp} и интегрируя полученное уравнение, находим формулу для минимальной скорости, при которой может наблюдаться эффект Кэя:

$$V_{in,min} \approx \left(\frac{\pi}{\rho n \dot{\gamma}_c} \right)^{1/3} \left(\frac{3}{2} \eta_0 \dot{\gamma}_c L \right)^{2/3} \quad (4)$$

где ρ – плотность жидкости, L – длина струи внутри неподвижного слоя жидкости.

Наконец, минимальная высота может быть с достаточной точностью вычислена по формуле

$$h_{min} = \frac{V_{in,min}^2}{2g} \quad (5)$$

Второй способ основывался на том, что раз существует слой с низкой вязкостью между струёй и неподвижным слоем жидкости, то между ними не должен происходить обмен веществом. Приравнявая массовые расходы на «входе» и «выходе» струи, получим

$$\begin{aligned} \dot{m}_{in} &= \rho \pi R_{in}^2 V_{in} = \dot{m}_{out} = \rho \pi R_{out}^2 V_{out} \\ R_{in}^2 V_{in} &= R_{out}^2 V_{out} \quad (6) \end{aligned}$$

где R_{in} , R_{out} – соответственно радиусы поперечного сечения струи на «входе» и «выходе», а V_{in} , V_{out} – соответственно скорости течения струи на «входе» и «выходе» струи.

Минимальная высота выливания жидкости, необходимая для наблюдения эффекта Кэя, была вычислена экспериментально и совпала с рассчитанной теоретически. Соотношение 5 было подтверждено на практике.

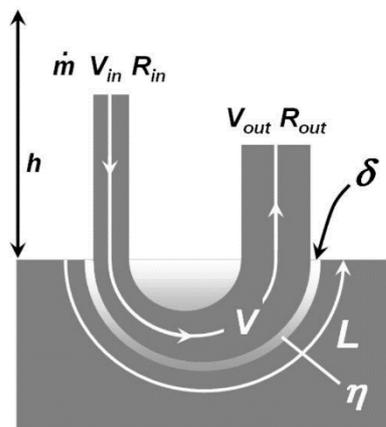


Рис. 3. Схематичное изображение эффекта

Литература

1. Versluis M., Meer D.V. D., Blom C., Weele K.V. D. // Journal of Statistical Mechanics Theory and Experiment. 2006.

УДК 53.088

Трактовка случайных и систематических ошибок измерений в научных исследованиях

К.Н. Белов¹, Ю.В. Мухин^{1,2}, Н.Д. Кундикова^{1,2}

¹Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)

²Институт электрофизики УрО РАН

Методам обработки результатов физических измерений и оценке их погрешностей посвящено немало книг, методических пособий, видео-интернет курсов (например, [1–3]). Целью настоящей работы не является критический обзор огромного количества литературы по этой теме. Здесь мы обсуждаем широко распространённые заблуждения и путаницу в вопросе сложения ошибок. Следует заметить также, что большинство методических пособий в этом отношении не соответствуют существующему в РФ ГОСТу Р 8.736-2011 [4]. Аккуратная трактовка ошибок измерения совершенно необходима только в научных исследованиях (например, космических, авиационных, и т.п.) или при создании детекторов с заданным высоким разрешением. Во всех других отраслях экономики простое следование стандартам и ГОСТам представляется, по-видимому, вполне достаточным и неспособным заметно навредить «народному хозяйству». В этом и есть причина повсеместного недостаточно внимательного отношения в ВУЗах к данному вопросу.

Вопрос сложения ошибок – прежде всего вопрос их сравнения. Когда одна ошибка намного меньше других, её не надо учитывать вообще [1]. Ниже мы полагаем, что все обсуждаемые ошибки есть величины примерно одного порядка.

I. Источники ошибок и разброса в результатах измерения физических величин

- Сама измеряемая физическая величина часто является случайной, имеющей дисперсию из-за своей природной стохастичности. Данный момент очень важен, поскольку такой разброс часто путают с систематической ошибкой. Так Зайдель [1] рекламирует «рандомизацию систематических ошибок», приводя во всех примерах в качестве систематики стохастичность самих измеряемых величин.
- Ошибки измерительной системы бывают разными:

- Случайные – следствие стохастичности измерительной системы. Они автоматически вносят вклад в природную дисперсию измеряемой физической величины.
- Ошибки округления – самый замысловатый тип измерительных ошибок.
- Собственно систематические ошибки измерительной системы включают: неточный ноль, несовершенство прибора, систематическую «косорукость» наблюдателя и другие. Они могут не зависеть от величины измерения, а могут быть линейными или нелинейными. Они могут быть разных знаков и в принципе асимметричными.
- Другими источниками ошибок могут быть методы и используемые алгоритмы, теории, сам дизайн и условия эксперимента. Все такие ошибки могут быть не симметричными и разных знаков.

II. Кардинальное отличие статистических ошибок от систематических

С вероятностной точки зрения, случайная и систематическая ошибки определяют совершенно разные параметры распределения результатов измерений. Случайная ошибка определяет дисперсию распределения, а систематическая – неточность положений среднего/максимума этого распределения.

Зайдель ([1] стр. 63) для доверительной вероятности 95% предлагает размер доверительного симметричного интервала $\Sigma = \delta + 2\sigma$, где σ – случайная ошибка среднего измеряемой величины, δ – систематическая. Что произойдёт с вероятностной информацией при попытке каким-то образом скомбинировать случайную и систематическую ошибки в одну? Всегда предлагается использовать квадратичное суммирование: $\Sigma = \sqrt{\delta^2 + (t\sigma)^2}$. Здесь видно пренебрежение асимметричностью систематической ошибки. Также неявно предполагается её стохастичность. При таком подходе, Σ уже не имеет никакого отношения к доверительным интервалам и вероятностям. Несложный подсчёт показывает, что вместо 95% интервала можно получить менее доверительный интервал (в самом неблагоприятном случае – менее 80%); а вместо 99,7% – вплоть до 90%. Если же не интересоваться доверительными интервалами, то можно предложить ряд равнозначных комбинаций δ и σ для «конечной» ошибки, а предложенная в ГОСТе [4] будет в этом ряду ничем не хуже других.

III. Измерительные ошибки округления.

Ошибку округления проще всего понимать как цену деления прибора, но она может быть и не симметричной.

В зависимости от конкретных измерений ошибки округления могут просто линейно складываться, или могут складываться квадратично. Будучи систематикой, ошибки округления могут комбинироваться квадратично со случайными, или рассматриваться как чисто систематические погрешности. ГОСТ [4] предлагает их просто складывать линейно, если таких ошибок только две.

IV. Собственно систематические ошибки.

Систематические ошибки не обязаны быть симметричными. Систематические отклонения не являются случайными величинами. Систематические ошибки могут не зависеть от размера измеряемой величины (неточный ноль), могут линейно от него зависеть или проявляться другим образом (класс точности прибора). Основное их свойство: они могут компенсировать друг друга независимо от того, известен ли нам их знак, или нет. Это и позволяет иногда избавляться от таких погрешностей вообще.

Как уже отмечалось, о сложении можно говорить только для ошибок примерно одного порядка, поэтому количество ошибок, которые хотелось бы сложить, может быть невелико. Систематические ошибки следует просто складывать линейно. Никому же не придёт в голову, складывать квадратично неточности нолей приборов. Студентам, как будущим экспериментаторам полезно думать о том, как можно избавиться от систематических ошибок, а не складывать их с чем-нибудь квадратично.

Итоговые замечания.

- Измерительные ошибки округления, будучи систематическими по сути, могут иногда трактоваться и складываться как случайные.
- Систематические ошибки нельзя складывать квадратично, но можно пытаться от них избавиться.
- В научных исследованиях случайные и систематические погрешности сохраняют отдельно, что позволяет как сравнивать результаты измерения разных групп, так и комбинировать их в один.
- Вычисление одной конечной ошибки хотя и даёт общее представление о погрешности измерений, но не содержит достоверной вероятностной информации об их распределении.
- Большинство пособий в части трактовки систематических ошибок не соответствуют принятому ГОСТу Р 8.736-2011.

Литература

1. *Зайдель А.Н.* Элементарные оценки ошибок измерений. Ленинград: Наука, 1968.
2. *Taylor J.R.* An Introduction to Error Analysis // University Science Books, 1997.
3. *Попов П.В.* Курс видео-лекций МФТИ «Обработка результатов эксперимента». <https://www.youtube.com/watch?v=RFfC2qOqZ9M>, 2019.
4. ГОСТ Р 8.736-2011 Измерения прямые многократные. М.: Стандартинформ, 2013.

Моделирование траекторий ускоренных электронов в плазменных ускорителях

В. С. Захарова

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

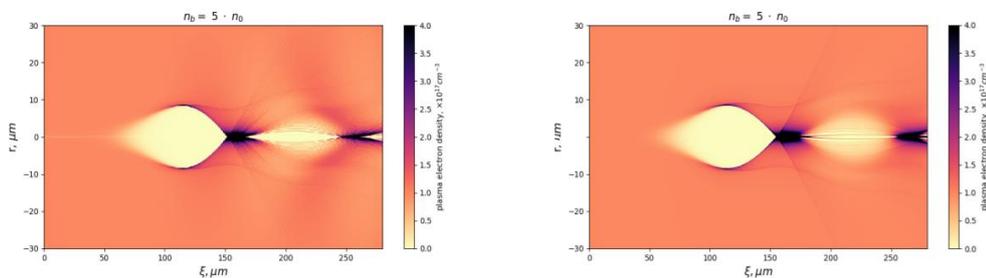
Плазменное ускорение – это метод ускорения заряженных частиц, таких как электроны, позитроны и ионы, с использованием электрического поля, связанного с электронной плазменной волной или другими высокोगradientными плазменными структурами. Подобные структуры создаются либо с использованием ультракоротких лазерных импульсов, либо посредством релятивистских пучков частиц. Эти методы позволяют создавать высокоэффективные ускорители частиц гораздо меньшего, по сравнению с классическими ускорителями, размера.

Пучок высокорелятивистских частиц, распространяющийся через плазму, активирует так называемый режим «пузыря», при котором все электроны плазмы вытесняются с оси распространения пучка и образуется ионная полость.

Траектории электронов плазмы пересекаются друг с другом, поэтому для оценки силы Лоренца необходимо рассмотреть каждый отдельный электрон и рассчитать его движение с учетом всех действующих электрических и магнитных полей.

Упрощение, рассматриваемое в данной работе, подразумевает наличие азимутальной симметрии задачи. Это позволяет нам рассматривать не каждый отдельный электрон, а тонкие кольца с центром вокруг оси распространения. В рамках модели колец пересечение траекторий электронов означает, что эти кольца могут произвольно изменять свой радиус и пересекать друг друга. Мы также предполагаем, что движущий луч не эволюционирует в течение времени, необходимого для прохождения частиц плазмы. Последнее приближение называется «квазистатическим приближением» или «приближением замороженного поля», которое основано на многомасштабном характере физического процесса.

Общая идея проекта заключается в создании теоретических и численных моделей ускорения плазменного кильватерного поля. Наиболее успешные в данной отрасли модели реализованы посредством PIC (Particle-In-Cell) кодов. Поэтому для проверки состоятельности нового квазистатического кода использовались расчеты, полученные с помощью FBPIC. Актуальность написания нового, простого и быстрого кода, заключается в том, что такие громоздкие коды, как PIC, не очень удобны для повседневного использования, в связи с большими временными затратами, необходимыми для выполнения симуляций.



(a) Our model, non-relativistic case

(b) PIC, non-relativistic case

Рис. 1: Распределение плотности электронов в плазме;

n_b - плотность пучка возбуждения, заданная по отношению к фоновой плазме

С помощью нового квазистатического кода были реализованы численные симуляции для двух нелинейных случаев: нерелятивистского и сильно релятивистского. Результаты, полученные для первого случая, достаточно хорошо согласуются с FBPIC (рис. 1), но было получено различие во втором случае, исследование которого будет продолжено.

Литература

1. *P. Muggli*. Beam-driven, Plasma-based Particle Accelerators.(arXiv:1705.10537): 119–142. 24 p, May 2017. 24 pages, contribution to the CAS - CERN Accelerator School: Plasma Wake Acceleration, CERN, Geneva, Switzerland, 23–29 Nov 2014.
2. Wikipedia contributors. Wake – Wikipedia, the free encyclopedia, 2021. [Online; accessed 15-March-2021].
3. Wikipedia contributors. Plasma acceleration // Wikipedia, the free encyclopedia, 2021. [Online; accessed 15-March-2021].
4. *W. Lu, C. Huang, M. Zhou, M. Tzoufras, F.S. Tsung, W.B. Mori, and T. Katsouleas*. A nonlinear theory for multidimensional relativistic plasma wave wakefields). *Physics of Plasmas*, 13(5):056709, May 2006.
5. *Severin Diederichs*. Positron acceleration with beam-driven plasmaaccelerators, 2019. [Master thesis, Hamburg].

6. *Gaël Massé*. An analytical description of the hollow plasma channel, 2016. [Projet de Fin d'Etudes (PFE), Laboratoire d'Optique Appliquée (LOA)].
7. *Rémi Lehe, Manuel Kirchen, Igor A. Andriyash, Brendan B. Godfrey, and Jean-Luc Vay*. A spectral, quasi-cylindrical and dispersion-free particle-in-cell algorithm. *Computer Physics Communications*, 203:66–82, 2016.

УДК 537.811

Исследование деформации капли ферромагнитной жидкости в магнитном поле

Е.С. Зворыгина

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Ферромагнитная жидкость (фмж) представляет собой коллоидную систему, состоящую из мелких ферромагнитных частиц в растворе, в качестве которого выступает чаще всего вода или керосин. При этом является парамагнетиком с высокой магнитной восприимчивостью [1]. Область применения ферромагнитной жидкости широка. Фмж используется в машиностроении для уменьшения силы трения, в высокочастотных динамиках для отвода тепла, на кораблях NASA для стабилизации. В последнее время активно ведутся исследования в области терапии опухолей.

Исследование поведения ферромагнитной жидкости в однородном магнитном поле изучено хорошо в литературе, но не в полной мере [2]. Численно и экспериментально доказано, что расщепления в основном симметричны и размер сестринской капли можно контролировать с помощью поля. В неоднородном магнитном поле из-за градиента поля наблюдаются более сложные картинки. Из-за неравномерности распределения плотности поля сестринские капли могут получаться разных размеров, существующие методы не позволяют достаточно точно его контролировать.

В данной работе были рассмотрены деформации капель в однородном магнитном поле на разных поверхностях и попытка контроля распада капель в однородном поле на гидрофобной и гидрофильной поверхностях. Исследуемыми жидкостями были выбраны фмж на основе керосина и воды.

В качестве самого простого случая рассмотрена ферромагнитная капля на гидрофильной поверхности. Экспериментально подтверждено, что неоднородный градиент силового поля позволяет образовываться игольчатой структуре, выстроенной вдоль магнитных линий [3].

Гидрофобная поверхности позволяет рассмотреть поведение ферромагнитной капли без растекания по поверхности. В этом случае наблюдается вытягивание капли в гантелеобразные структуры. Сестринские капли соединены друг с другом с помощью канальцев. При этом подобные каналы под действие магнитного поля могут рваться и создавать независимые капли или объединяться, создавая новые капли.

На сверхгидрофобной поверхности было получено, что ферромагнитная капля распадаться на более мелкие сестринские капли, при этом в центре остается некоторая независимая капля [4]. Приложение однородного магнитного поля обеспечивает контроль над размером распавшихся капель и их количеством, а сверхгидрофобность обеспечивает возможность каплям не контактировать между собой, не соединяясь в новые капли. Размер центральной капли зависит от магнитного поля, чем сильнее поле, тем меньше капля остается вне зависимости от первоначального количества ферромагнитной жидкости.

Литература

1. *Ronald E. Rosensweig*. Magnetic fluids, *Ann. ReV. Fluid Mech.* 1987. 19: 437–63.
2. *Ronald E. Rosensweig*. *Ferrodynamics*, New York, Cambridge, 1985.
3. *Noel A. Clark*. Ferromagnetic ferrofluids, *Nature*, vol.504 P. 229–230.
4. *Surfaces Jaakko, Timonen V. I., Mika Latikka, Ludwik Leibler, Robin Ras H.A., Olli Ikkala*. Switchable Static and Dynamic Self-Assembly of Magnetic Droplets on Superhydrophobic, *SCIENCE*, V. 341, Issue 6143, P. 253–257.

УДК 535.8

Лазерная передача информации и система «прослушки»

С.В. Колесников, Г.Г. Адамян

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Тезис. Создана система, позволяющая передавать информацию при помощи лазерного луча. Также важной частью работы является исследование возможностей «прослушки» с помощью данной системы.

Система лазерной передачи информации. Установка состоит из передатчика (рис. 1) и приемника (рис. 2). Передатчик представляет собой интегральную микросхему, которая на вход получает сигнал из канала

AUX. Далее данный сигнал модулируется по амплитуде и подается на лазер. Модулированное лазерное излучение, пройдя некоторое расстояние в пространстве, попадает на фоторезистор приемника, где преобразуется в аналоговый сигнал, который подается на динамик.

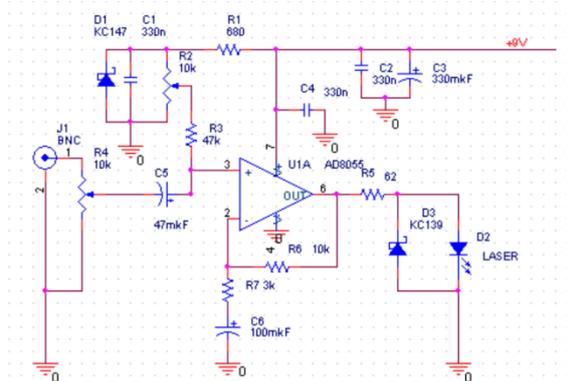


Рис. 1

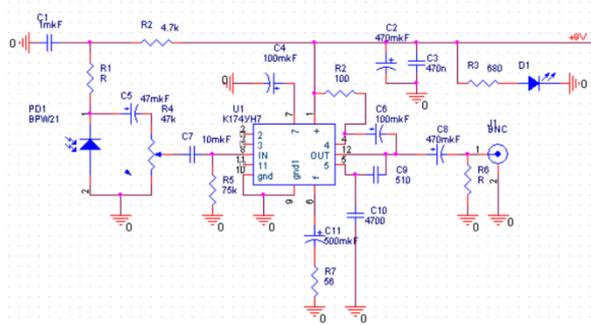


Рис. 2

Система «прослушки». При разговоре, или любом другом наличии акустических волн, у рядом стоящих предметов начинает колебаться поверхность. Можно приклеить к такой поверхности отражающий элемент и начать светить на него каким-либо стационарным лазерным излучением. Положение приемника выбирается так, чтобы отраженный луч в среднем попадал в центр фоторезистора. Колебания отражающей поверхности, вследствие акустических волн, приводят к колебаниям отраженного луча. А они, в свою очередь, меняют интенсивность падающего на приемник излучения. В итоге колеблющийся отраженный элемент модулирует сигнал лазера. Так как колебания отражающего элемента скоррелированы с акустическими волнами, то таким способом мы можем «прослушать» информацию с большого расстояния. Общая схема установки изображена на рис. 3.

У данной установки мы исследовали спектральные характеристики. В итоге удалось получить хорошие результаты с прикладной точки зрения. Направляя лазерный луч на поверхность окна, получилось прослушать речь человека в хорошем качестве.

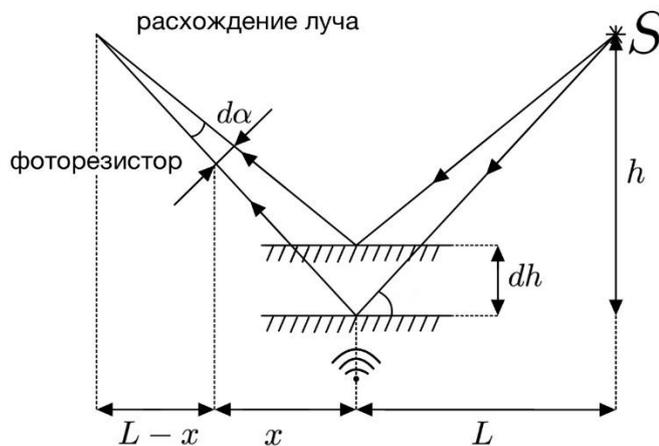


Рис. 3

Секция проблем безопасного развития атомной энергетики

УДК 519.62

Решение двумерной задачи поиска стационарного распределения температуры стержневого твэла с несимметричным положением топливной таблетки

А.П. Долгодворов

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Рассматривается задача несимметричного стационарного распределения температуры в твэле со смещенной и прижатой с одной стороны к внутренней поверхности оболочки таблеткой. Постановка задачи двумерная – по r и по φ . Распределение температуры является решением уравнения Пуассона, которое находится с использованием метода конечных элементов. Используется решатель FEniCS [1]. Параметризация задачи характерна для быстрых реакторов и выполнена следующим образом: радиус наружной поверхности оболочки $r_c = 3,45$ мм, внутренней $r_g = 3,05$ мм, радиус таблетки $r_p = 2,9$ мм, температура по всей окружности внешней поверхности оболочки (граничное условие первого рода) $T(r_c, \varphi) = 723$ К, где $\varphi \in [0; 2\pi]$, коэффициент теплопроводности таблетки $\lambda_p = 17$ Вт/(м·К), зазора $\lambda_g = 0,152$ Вт/(м·К), оболочки $\lambda_c = 23$ Вт/(м·К), выделяемая в таблетке линейная мощность $q = 20$ Вт/м, смещение таблетки $l = 0,14$ мм. Визуализация решения на двумерной координатной плоскости представлена на рис. 1. Температурный профиль по оси Ox при координате $y = 0$ показан на рис. 2. Для сравнения на рис. 2 дан, в том числе, и температурный профиль для задачи с симметричным расположением топливной таблетки. Граничные условия на внешней поверхности оболочки для симметричного и несимметричного положения таблетки ставятся одинаковыми, т.е. $T(r_c, \varphi) = 723$ К, где $\varphi \in [0; 2\pi]$. Все параметры для симметричного расположения таблетки полностью повторяют параметры для несимметричного расположения.

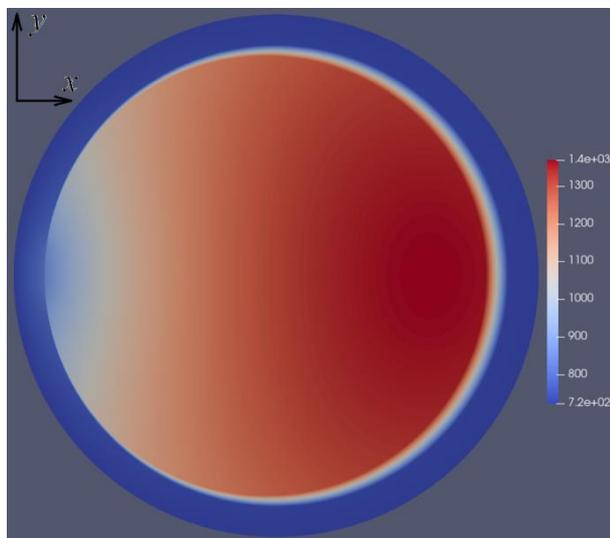


Рис. 1. Визуализация решения уравнения Пуассона для стационарного распределения температуры в сечении твэла со смещенной таблеткой, начало координат расположено в точке равноудаленной от окружности, лежащей на внешней поверхности оболочки в рассматриваемом сечении, указанные на шкале числа соответствуют температуре в единицах К

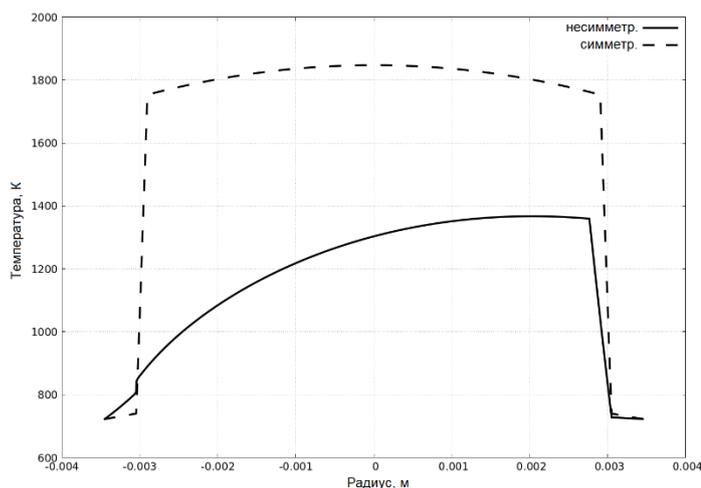


Рис. 2. Распределение температуры вдоль оси Ox при $y = 0$ для случая с несимметричным и симметричным расположением топливной таблетки внутри оболочки твэла

Таким образом, из решения можно видеть, что в случае прижатой к оболочке таблетки теплосъем идет в значительной степени больше, чем при симметричном расположении таблетки. Это приводит к снижению максимальной температуры в таблетке примерно на 400 К в рассмотренных условиях. При этом сток тепла в теплоноситель в том районе, где таблетка соприкасается с оболочкой больше, чем для симметричного случая, что приводит к росту температуры на внутренней поверхности оболочки на этом участке по сравнению с симметричным случаем.

Литература

1. Logg A., et al. Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method. Springer, 2012.

УДК 621.039

Микроскопическая модель миграции жидкого включения в поле постоянного градиента температуры

А.Р. Аветисян, О.О. Корчагина, Л.В. Матвеев

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Каменная соль (галиты) – широко распространенная горная порода, которая, несмотря на легкую растворимость в воде, сохраняется среди геологических формаций различных континентальных структур в течение сотен миллионов лет. Каменная соль – первая, и пока единственная геологическая формация, которая была рекомендована МАГАТЭ и реально использована для подземной изоляции радиоактивных отходов (РАО). Несмотря на отсутствие грунтовых вод на больших масштабах, в соляных породах всегда присутствуют мелкие включения, содержащие рассол, которые могут мигрировать под воздействием градиента температуры к источнику тепла – к месту захоронения (РАО).

Настоящая работа посвящена математической модели эволюции жидкого включения в геологической породе галитов в поле градиента температуры. Из-за этого градиента соль на границе включения неравномерно растворяется и оседает. На «горячей» границе включения происходит растворение соли, а на «холодной» – оседание. Данный эффект приводит к движению включения вдоль градиента температуры, к источнику тепла, с одновременным изменением его формы – вытягиванию вдоль изотермического направления [1].

Математическая модель вышеуказанных процессов описывается уравнениями

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{V} \nabla C - D \Delta C = 0 \quad (1)$$

Граничные условия:

$$C|_{\Gamma} = C_e(T) \cdot \exp\left(\frac{\Delta\mu}{RT}\right) \exp\left(-\frac{v_s \Delta p}{RT}\right) \quad (2)$$

$$D \frac{\partial C}{\partial n} \Big|_{\Gamma} = -C_s V_n \quad (3)$$

Начальные условия:

$$\begin{aligned} C(t=0) &= C_{e0} \\ T(t=0) &= T_0 \end{aligned} \quad (4)$$

где V_n – нормальная скорость границы, C_s – концентрация соли в твердой породе, $\Delta\mu$ – изменение кинетического потенциала на границе, C_{e0} – равновесная концентрация, $p = \gamma \frac{dA}{dV}$ – избыточное давление, γ – поверхностное натяжение.

$$\Delta\mu(V) = \begin{cases} -K_D, & V > V_0 \\ K_S, & V = -V_0 \\ -V, & |V| = V_0 \end{cases} \quad (5)$$

Здесь V_0 – некоторая характерная скорость, промежуточная между скоростями растущей и растворяющейся грани и скоростями торцевых граней. Для обеспечения сквозного (безытерационного) счета кусочно-постоянная функция (5) аппроксимируется непрерывной функцией:

$$\begin{aligned} \Delta\mu &= a + b \cdot \tanh(V/V_0 - x_0) \\ a &= \frac{1}{2}(K_S - K_D) \\ b &= -\frac{1}{2}(K_D + K_S) \\ x_0 &= \operatorname{arctanh}(a/b) \end{aligned} \quad (6)$$

Уравнение (1) с граничными и начальными условиями (2,3) и начальными (4) аппроксимируется методом конечных элементов на треугольных неструктурированных подвижных сетках. Для определения скоростей границ V_i и перестроения узлов сетки используется следующая процедура: принимается допущение, что все узлы вдоль границ имеют одинаковую соответствующую скорость V_i ; решается система нелинейных уравнений относительно V_i , полученная из граничного условия (2); результат используется в качестве граничных условий для уравнения, определяющего скорости узлов. Предполагается, что область заполнена несжимаемой жидкостью, течение во включении потенциально, поэтому для нахождения скоростей в области в данной задаче используется уравнение Пуассона.

Программная реализация численных методов была осуществлена с помощью открытой программной среды *fenics* [5].

Результаты решения представлены на рис. 1. Верхняя кривая демонстрирует эволюцию изотермического размера включения, нижняя – размера включения сонаправленного с градиентом температуры. Характер кривых соответствует результатам эксперимента [1]. На количественное рассогласование во времени стабилизации влияют два основных фактора: во-первых, двухмерная постановка модельной задачи, в отличие от реального трехмерного эксперимента, и, во-вторых, аппроксимация $\Delta\mu$ функцией (6), которая в дальнейшем может быть заменена более подходящей функцией.

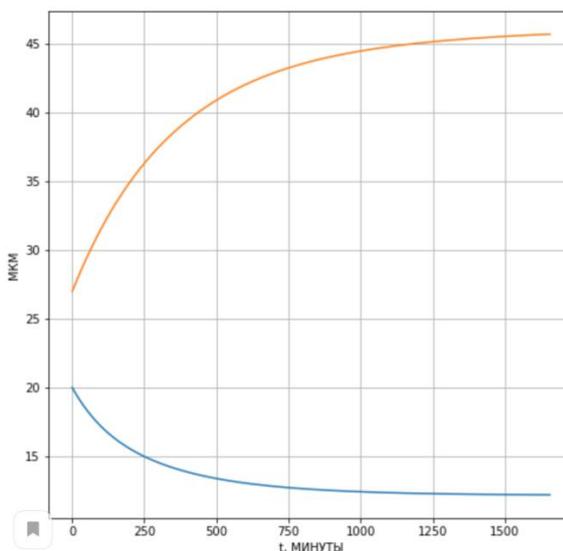


Рис. 1. Эволюция размеров включения

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 20-08-01192).

Литература

1. *Anthony T.R., Cline H.E.* Thermal migration of liquid droplets through solid., *Journal of Applied Physics* 42, 3380–3387 (1971).

УДК 621.039

Расчётный анализ неопределённости последствий тяжёлой аварии с полным обесточиванием АЭС с ВВЭР-1000

Н.Д. Гембицкий^{1,2}, К.С. Долганов²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Прогнозирование протекания запроектных аварий на ядерных энергетических установках, связанных с их обесточиванием, является актуальной задачей. Подобная авария произошла на АЭС «Фукусима-1» в 2011 г. [1]. Результаты прогнозирования, получаемые при помощи численного моделирования, позволяют оценивать безопасность АЭС и повышать готовность к нештатным ситуациям.

В данной работе рассматривается авария на АЭС с реактором ВВЭР-1000 [2], исходным событием для которой служит полное прекращение электроснабжения, а в качестве дополнительного отказа оборудования рассматривается отказ на закрытие БРУ-А (быстродействующей редуцирующей установки с выхлопом в атмосферу), например, из-за землетрясения. Также считается, что действия операторов по управлению аварией невозможны или неэффективны. Основной опасностью такой аварии является разрушение активной зоны при высоком давлении в первом контуре, которое может привести к разрыву трубок парогенератора (ПГ) из-за снижения прочностных свойств материала трубок при их нагреве [3]. При этом создается возможность байпасирования защитной оболочки продуктами деления и их раннего выхода в окружающую среду через открытые БРУ-А. Факт и количество разорванных трубок определяют размер радиоактивного выброса из первого контура за пределы защитной оболочки и являются величинами неопределёнными. Поэтому важной задачей является расчетное подтверждение возможности разрыва трубок на ВВЭР-1000, а анализ влияния неопределённости радиоактивного выброса в зависимости от числа отказавших трубок.

Для моделирования развития событий применялся интегральный тяжелоаварийный код СОКРАТ [4]. Расчетный код СОКРАТ предназначен для комплексного численного моделирования динамики процессов, происходящих в реакторных установках с водяным теплоносителем типа ВВЭР при тяжелых запроектных авариях. По результатам расчета была восстановлена хронология событий и показана принципиальная возможность нагрева и разрыва трубок парогенератора через 3,5–4 ч аварии.

Для анализа неопределённости в развитии аварии было принято различное количество разорванных трубок – 5, 10 и 15. Возможность разрыва связана с тем, что в процессе аварии теплоноситель покидает первый

контур через импульсное предохранительное устройство, компенсирующее повышение давления (рис. 1), а образовавшиеся в главных циркуляционных петлях гидрозатворы, препятствующие естественной циркуляции парогазовой среды по петлям, выкипают. После очищения гидрозатвора в 4-й петле горячая среда переносится из активной зоны в парогенератор № 4 и нагревает теплообменные трубки, что приводит к потере их прочности. Для точной оценки прочности требуется детальный трехмерный расчет, с учетом же модельных возможностей кода СОКРАТ условие разрыва определялось по критерию превышения окружным напряжением его максимально допустимого значения при текущей температуре трубок, а число разорванных трубок постулировалось. Окружное напряжение определялось по формуле для толстостенной цилиндрической оболочки с учетом внутреннего и внешнего давлений [3].

В работе показано, что протекание аварии для случая разрыва 5 трубок качественно отличается от случая разрыва 10 и 15 трубок и определяется направлением циркуляции парогазовой смеси через активную зону. Так, при разрыве 10 и 15 трубок возникает обратный ток парогазовой смеси через активную зону, горячий газ вызывает быстрый нагрев нижней части активной зоны, что заканчивается потерей устойчивости ТВС, образованием расплава и, в итоге, проплавлением корпуса реактора спустя 5 часов после начала аварии. В случае же 5 трубок прямая циркуляция через активную зону сохраняется, зона разрушается сверху вниз и лишь частично, а корпус в течение 8 часов остается целым.

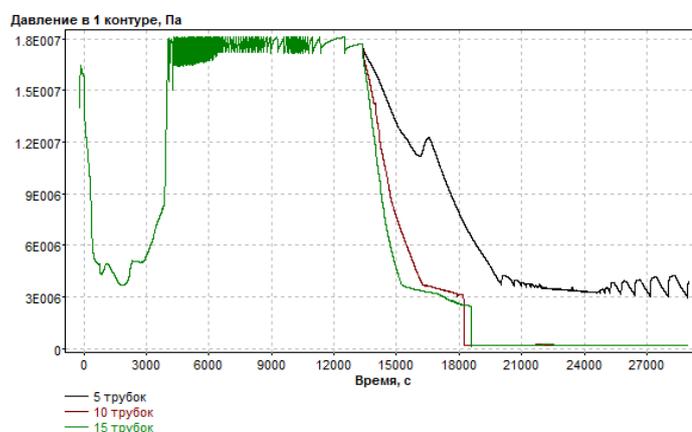


Рис. 1. Давление в первом контуре

Соответственно, выбросы радиоактивных веществ в окружающую среду также отличаются (рис. 2). Интегральный выброс цезия и йода для разных случаев разрыва трубок совпадает по порядку. Однако для 5 трубок длительность выброса значительно больше, он происходит ближе к концу 6 часов аварии, когда начинается массовое разрушение твэлов. После разрыва 10 и 15 трубок основной выброс начинается почти немедленно. Таким образом, в зависимости от числа отказавших трубок ПГ неопределенность выброса Cs и I может составлять до 300%.

Важным результатом работы является демонстрация того, что до 75% от массы радиоактивных веществ, вышедших из топлива, осаждается в первом контуре, причем до 50% – в теплообменных трубках аварийного парогенератора. В дальнейшем развитии данной работы будут изучены возможности для усиления осаждения радиоактивных аэрозолей на участке второго контура от разрыва трубки до выхода в окружающую среду с целью снижения величины выброса.

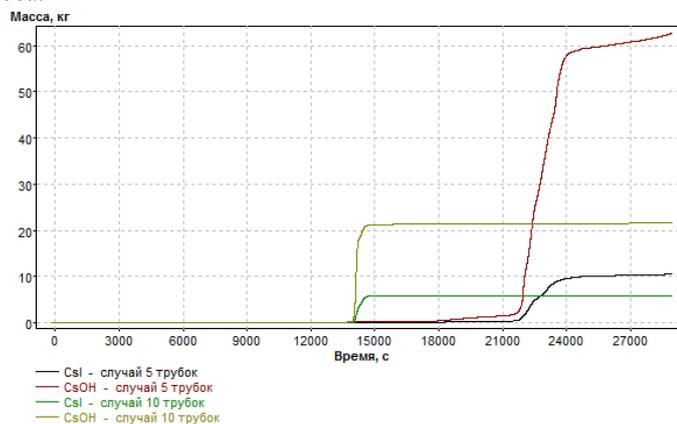


Рис. 2. Масса CsI и CsOH, вышедшая в окружающую среду в случае разрыва 5 и 10 трубок

Литература

1. The Fukushima Daiichi Accident: Report by the Director General. Vienna: International Atomic Energy Agency, 2015
2. Андрушечко С.А., Афров А.М., Васильев Б.Ю., Генералов В.Н., Косоуров К.Б., Семченков Ю.М., Украинцев В.Ф. АЭС с реактором типа ВВЭР-1000. От физических основ эксплуатации до эволюции проекта. М.: Логос, 2010. 604 с.
3. Долганов К.С., Томащук Д.Ю., Киселев А.Е., Капустин А.В., Мохов В.А., Быков М.А., Семишкин В.П., Сорокин Ю.С. Анализ возможности массового разрушения теплообменных труб ПГ при тяжелых авариях на РУ ВВЭР-1200/491 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Обеспечение безопасности АЭС. 2011. № 29.
4. Bolshov L.A., Dolganov K.S., Kiselev A.E., Strizhov V. F. Results of SOCRAT code development, validation and applications for NPP safety assessment under severe accidents // Nuclear Engineering and Design 341, 2019, P. 326–345.

УДК 621.039.54

Синтез сложных оксидных композиций для уран-ториевого ядерного топлива в неравновесной плазме факельного разряда

А.Е. Тихонов, И.Ю. Новоселов

Томский политехнический университет

На сегодняшний день значительную часть атомной энергетики составляют АЭС, использующие керамическое ядерное топливо из диоксида урана, обогащенного по изотопу уран-235. Такое топливо обладает рядом недостатков, среди которых стоит выделить низкую теплопроводность и необходимость в дорогостоящем изотопном обогащении.

В то же время перспективным направлением дальнейшего развития атомной энергетики является тенденция к созданию дисперсионного ядерного топлива, которое представляет собой композицию ядерного топлива, в котором делящаяся фаза находится в виде частиц (металл, соединение), равномерно распределенных в матрице из неделящегося материала. Такое топливо обладает хорошими механическими свойствами, а материал матрицы и определяет радиационную стойкость и высокую теплопроводность топлива [1].

Основными технологиями получения оксидных композиций для дисперсионного ядерного топлива являются термическое разложение, восстановление оксидов, электролитическое получение из расплавленных солей, золь-гель процесс. Общими недостатками применяемых технологий являются: многостадийность, высокая стоимость переработки сырья, неравномерное распределение фаз в продукте, необходимость использования большого количества химических реагентов.

В то же время технология синтеза оксидных композиций в воздушной плазме обладает следующими преимуществами: одностадийность, гомогенное распределение фаз с заданным стехиометрическим составом, возможность активно влиять на размер и морфологию частиц [2].

Следует отметить, что переработка азотнокислых растворов в плазме достаточно затратна. Для уменьшения энергозатрат прибегают к добавлению в состав растворов органического компонента, который, окисляясь в воздушной плазме, привносит дополнительную энергию, позволяя увеличить расход перерабатываемого раствора и, таким образом, увеличить выход целевого продукта.

В работе было проведено термодинамическое моделирование процесса плазмохимического синтеза сложных оксидных композиций из водно-органических нитратных растворов (ВОНР), состоящих из делящегося материала и материала матрицы. В качестве делящегося включения рассматривались оксиды урана и тория, в качестве материала матрицы – оксид магния, ацетон использовался в качестве органической добавки. Доля топливного включения в целевой сложной оксидной композиции выбиралась в пределах 90–99%, при этом соотношения $UO_2/(UO_2 + ThO_2)$ принималось 0,1–0,3, а доля матрицы – в пределах 1–10%.

В результате моделирования были рассчитаны оптимальные составы ВОНР на основе нитратов уранила, тория и магния, а также ацетона. Были определены оптимальные режимы плазменной обработки ВОНР: доля воздушного плазменного теплоносителя (67–71%), давление (1 атм.) и температурный интервал (1000–2000 К). Показано, что при избытке воздуха, из исходных растворов образуются нецелевые продукты (UO_3 , U_3O_8 , U_4O_9), при недостатке – продукты неполного термического разложения углеводородов ВОНР (сажа).

Результаты проведенных исследований могут быть использованы для расчета плазмохимического синтеза сложных оксидных композиций для дисперсионного ядерного топлива.

Литература

1. Алексеев С.В., Зайцев В.А., Толстоухов С.С. Дисперсионное ядерное топливо. М.: Техносфера. 2015. 248 с.
2. Новоселов И. Ю., Тихонов А. Е. Плазмохимический синтез оксидных композиций для ядерного топлива уран-ториевого цикла // Ползуновский вестник. 2020, № 1. С. 100–104.

Классическая диффузия в анизотропной среде с крупномасштабными неоднородностями

Кондратенко П.С.^{1,2}, Матвеев А.Л.¹, Обухов Ю.Н.¹

¹Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Для обоснования надежности подземных захоронений РАО необходимы модели, адекватно описывающие перенос примесей в сильно неоднородных геологических формациях. В работе [1] был предложен метод, позволяющий эффективно моделировать перенос в средах с крупномасштабными неоднородностями. В данной работе предлагается модель, позволяющая описывать перенос на основе классической диффузии в анизотропных средах с крупномасштабными неоднородностями.

Наличие анизотропии приводит к тому, что вместо скаляра коэффициент диффузии имеет вид тензора. В результате, уравнение диффузии принимает вид

$$\frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \partial_j (D^{jk}(\mathbf{r}) \partial_k c(\mathbf{r}, t)), \quad (19)$$

где $c(\mathbf{r}, t)$ – концентрация примеси, зависящая от координаты и времени, а $\mathbf{r} = x^k$ – радиус-вектор, $k = 1, 2, 3$,

$\partial_i = \frac{\partial}{\partial x^i}$, $D^{ij} = D^{ji}(\mathbf{r})$ – симметричный тензор диффузии.

Аналогично результатам работы [1], решение уравнения (19) на асимптотически далёких расстояниях, то есть, когда расстояние от источника до точки наблюдения велико в сравнении с размерами основной области локализации примеси, представимо в виде произведения убывающей экспоненты с показателем, существенно больше единицы, и медленно меняющегося с расстоянием предэкспоненциальным множителем:

$$c_p(\mathbf{r}) = A_p(\mathbf{r}) e^{-\Gamma_p(\mathbf{r})}, \quad \Gamma_p(\mathbf{r}) \gg 1. \quad (20)$$

Для получения функций, входящих в выражение (20), уравнение (19) раскладывалось по малому параметру $|\nabla \Gamma_p(\mathbf{r}) L|^{-1}$, где L – характерный масштаб изменения коэффициента диффузии. Уравнение для функции, стоящей в показателе экспоненты, имеет вид

$$p - D^{ij} \partial_i \Gamma_p \partial_j \Gamma_p = 0. \quad (21)$$

Для решения уравнения (21) вводился вектор касательной к «траектории концентрационного сигнала» $u^i = g^{ij} \partial_j \Gamma_p(\mathbf{r})$. Тогда по аналогии с уравнением для геодезической линии в общей теории относительности [2], для u^i справедливо уравнение

$$\frac{du^i}{ds} + \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} u^j u^k = 0, \quad (22)$$

где введены символы Кристоффеля $\left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} = -\frac{1}{2} g^{il} (\partial_j g_{kl} + \partial_k g_{jl} - \partial_l g_{kj})$ в пространстве с метрикой $ds^2 = g_{jk} dx^j dx^k$, где $g^{ij} = \frac{1}{p} D^{ij}(\mathbf{r})$, $g_{ij} = p D_{ij}(\mathbf{r})$, $D^{ij}(\mathbf{r}) D_{jk}(\mathbf{r}) = \delta_k^i$. Тогда значение $\Gamma_p(\mathbf{r})$ вдоль траектории определяется выражением

$$\Gamma_p(\mathbf{r}) = \int ds = \int_0^r \sqrt{g_{jk} dx^j dx^k}. \quad (23)$$

Уравнение для предэкспоненциального множителя $A_p(\mathbf{r})$ получается при подстановке решения (20) в исходное уравнение концентрации (19) и разложении этого уравнения по следующему порядку малости $|\nabla \Gamma_p(\mathbf{r})L|^{-1}$:

$$2g^{ij}\partial_i A_p(\mathbf{r})\partial_j \Gamma_p(\mathbf{r}) + A_p(\mathbf{r})\partial_i g^{ij}\partial_j \Gamma_p(\mathbf{r}) + A_p(\mathbf{r})g^{ij}\partial_i \partial_j \Gamma_p(\mathbf{r}) = 0. \quad (24)$$

В результате решение задачи классической диффузии для анизотропной неоднородной среды выглядит следующим образом:

$$c(\mathbf{r}, t) = \frac{N}{\sqrt{D_0} (4\pi t)^3} \exp \left[-\frac{1}{4t} \left(\int_0^r \sqrt{D_{jk}} dx^j dx^k \right)^2 + F(\mathbf{r}) \right], \quad (25)$$

где $F(\mathbf{r}) = -\int_0^r ds \left(\frac{1}{2} \partial_i u^i - \frac{1}{s} \right)$, $D_0 = \det[D^{ij}(0)]$.

Литература

1. Кондратенко П.С., Асимптотический подход к описанию неклассических процессов переноса. Принцип Ферма // Письма в ЖЭТФ, 2017, Т. 106, № 9, С. 581–584.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория Поля. Москва, Физматлит, 2004.

УДК 669.2+66.02

Технология очищения воды от опасных радионуклидов с применением сорбционных технологий по аналогии с «урановым производством» с концептуальным предложением применением модульно-однофазовых кассет с БСРП

М.Ж. Буленбаев, А.Т. Хабиев, Б.Т. Алтайбаев, Е.А. Кожамсуғиров

АО «ИМиО»

Данная научная статья посвящена очищению радиоактивной воды, причиной радиации которой стала авария на атомной электростанции Фукусима-1 в Японии в 2011 году. Для ликвидации последствий аварии, а точнее, охлаждения ядерного реактора требуется колоссальное количество воды. С точки зрения технической физики произведена сравнительная аналогия с целью сравнения и применимости технологических процессов, которые можно применить с «переносом» по аналогии при разработке новых технических направлений. В этой статье предложена технология очищения воды от радиоактивных примесей с помощью модульно-кассетных биологических сорбентов растительного происхождения по аналогии с урановым производством. После очистки воду можно будет отправлять в океан, либо на повторное охлаждение, а биологический сорбент безопасно захоронить.

В 2011 году восточное побережье Японии постигло самое мощное в истории страны землетрясение магнитудой в 9 баллов. В считанные минуты на прибрежные города обрушилось цунами, а еще через некоторое время на атомной электростанции «Фукусима-1» произошла ядерная катастрофа, признанная одной из самых страшных в мире. На территории станции продолжают работы по ликвидации последствий аварии [1]. По оценке Токийской электроэнергетической компании (ТЕРСО), на приведение объекта в стабильное, безопасное состояние может потребоваться до 40 лет [2]. В течение длительного времени, пока разрушенное топливо в реакторных зданиях энергоблоков выделяет остаточное тепло, нужно обеспечивать его охлаждение. Обращение с загрязнённой водой представляет собой значительную проблему на площадке АЭС. Через контуры охлаждения блоков № 1–3 циркулирует около 400 т воды в день. Однако к ним добавляются сопоставимые объёмы грунтовых вод, ежедневно поступающие в подвалы зданий, и эта вода также становится радиоактивной. Для обращения с постоянно образующимися объёмами загрязнённой воды требуются системы очистки от радионуклидов. Вся вода, прошедшая через системы очистки, в настоящее время хранится на территории АЭС. В 2020 году её объём составил более чем 1 240 000 т.

В данной научной работе представлена технология очистки воды с помощью биологических сорбентов растительного происхождения по аналогии с урановым производством.

Сорбционные технологии урановых производств, имеющие потенциальную возможность применения в технологии получения чистой пищевой соли NaCl.

В настоящее время существуют различные сорбционные технологии урановых производств, имеющие потенциальную возможность применения в технологии получения чистой пищевой соли NaCl, такие как техно-

логия переработки урана в Республике Казахстан методом подземного скважинного выщелачивания и технология очищения радиоактивной воды от опасных радионуклидов с применением сорбционных технологий по аналогии с урановым производством» [3–4].

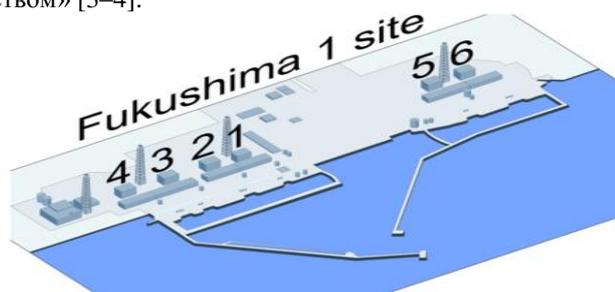
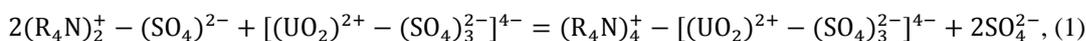


Рис. 1. Схема АЭС «Фукусима-1»

Технология переработки урана в Республике Казахстан методом подземного скважинного выщелачивания. Казахстан является мировым лидером по добыче урана и занимает третье место в мире по запасам. Урановую промышленность в Казахстане представляет АО «НАК «Казатомпром», которая ведет разработку 26 рудников способом подземного скважинного выщелачивания (ПСВ). Казахский метод признан МАГАТЭ как самый экологически чистый и безопасный в мире. К вышесказанному хотелось бы сказать, что накопленный казахстанский опыт добычи и переработки урана, а также, бережное отношение к экологии в Республике Казахстан на предприятиях Казатомпрома как пласт знаний принадлежал не только Казахстану, но и всему человечеству.

Смысл технологии ПСВ заключается в следующем – через закачные скважины к рудному интервалу урана подается выщелачивающий раствор (ВР) с определенным содержанием серной кислоты, который контактируя с пористым рудным телом горно-рудной массы (ГРМ) переводит уран в растворимую форму из его минеральных соединений (рис. 1, 2.). По мере прохождения ВР через ГРМ в сторону откачных скважин, происходит насыщение раствора ураном [5–6]. В ходе насыщения раствора ураном, ВР переходит в продуктивный раствор (ПР). Из откачных скважин с помощью погружных насосов ПР направляется через сборные коллекторы в пескоотстойники. Из пескоотстойников ПР направляется в цех по переработке продуктивных растворов (ЦППР), где с помощью ионообменных процессов производится съем урана из ПР. Основной процесс сорбции урана из ПР на ионообменных смолах, протекает по химической реакции (1):



где: $(R_4N)_2^+$ – ионообменная смола (анионит); $[(UO_2)^{2+} - (SO_4)_3^{2-}]^{4-}$ – уранилсульфатный комплекс.

После, растворы без урана т.е. ВР направляются обратно на ГТП, где на технологических узлах закисления (ТУЗы) заново происходит процесс добавления серной кислоты до определенной концентрации (в растворах), которые далее подаются обратно в закачные скважины. Тем самым растворы ПР и ВР находятся в постоянной замкнутой циркуляции. В Цехе переработки рудника по итогам ионообменных и аффинажных процессов получается Готовая Продукция – Закись Окись Урана (U_3O_8) экспортного качества [7–9].

УДК 621.039

Радиационное обследование здания реактора МР на соответствие конечному состоянию проекта вывода из эксплуатации

В.М. Вершинин, Е.А. Степанов, К.Ю. Козаков

Национальный научный центр «Курчатовский институт»

Работы по выводу из эксплуатации исследовательского реактора МР вступили в завершающую стадию в НИЦ «Курчатовский институт». В рамках работ демонтировано все оборудование реактора, деактивированы строительные конструкции здания, в котором он был размещен, реабилитирована прилегающая к зданию территория. В проекте вывода из эксплуатации были определены критерии конечного состояния радиационной обстановки объекта, которая должна соответствовать санитарно-гигиеническим нормативам персонала группы Б [1]. Конечное состояние объекта на завершающей стадии работ должно быть подтверждено заключительным радиационным обследованием.

Заключительное радиационное обследование включало использование как применение традиционных средств контроля, так и измерение удельной активности γ -излучающих радионуклидов с помощью средства из-

мерения «Корад» [2]. Данное средство использовалось в ходе производства демонтажных работ, в условиях неоднородного загрязнения оборудования реактора и сложного пространственного расположения источников γ -излучения. Что позволило оперативно представлять картину загрязнения в виде наглядных изображений распределения загрязнения. Ключевой особенностью этого метода является возможность прямого измерения удельной активности основных γ -излучающих радионуклидов и получение карт ее распределения (см. рис. 1), что играет решающую роль в процессе дезактивационных работ и реабилитационных мероприятий.

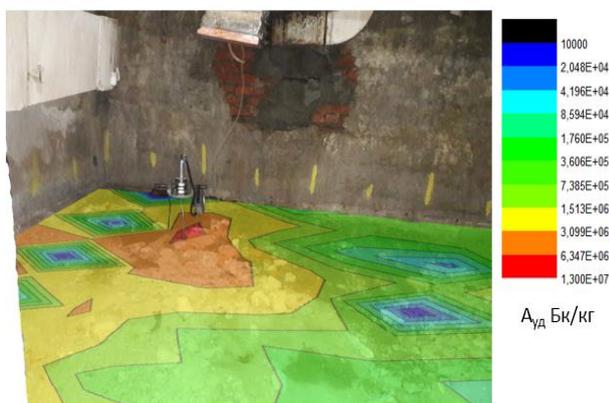


Рис. 1. Распределение удельной активности ^{137}Cs (Бк/кг) по полу помещения

Для наглядного представления данных измерений и их верификации выполнялась обработка результатов геостатистическими методами. Такая обработка данных позволяет проводить анализ и представление результатов в виде карт распределений, а также получение количественных результатов – интегральные оценки полученных данных, нахождение положения изолиний заданного уровня с наибольшей точностью.

Наряду с традиционными методами средство «Корад», продемонстрировавшее свою высокую эффективность, применялось также при проверке наличия остаточного загрязнения в фрагментах стен центрального зала.

На основе данных заключительного радиационного обследования можно сделать вывод, что помещения реактора и прилегающая территория соответствуют запланированному конечному состоянию, а работы по выводу из эксплуатации реактора МР успешно выполнены в полном объеме. Опробованы новые методы характеризации радиационной обстановки, позволяющие значительно повысить эффективность проведения работ.

Литература

1. Волков В.Г. [и др.]. Подготовка к выводу из эксплуатации исследовательского реактора МР в РНЦ «Курчатовский институт» // Атомная энергия, Т. 104, вып. 5, май 2008, С. 259–264.
2. Иванов О.П., Потапов В.Н., Степанов Е.А. О методе неразрушающих спектрометрических измерений (характеризации) объемного загрязнения грунта, бетона // АНРИ, № 2 (101), 2020, С. 3–17.

УДК 621.039.54

Плазмохимический синтез и исследование наноразмерных оксидных композиций, моделирующих дисперсионное REMIX-топливо

С.Ю. Кузнецов

Томский политехнический университет

Применяемое на атомных станциях керамическое урановое ядерное топливо из диоксида урана имеет существенные недостатки, такие как хрупкость, склонность к растрескиванию и низкая теплопроводность, что негативно сказывается как на безопасности, так и на КПД реакторных установок, короткий цикл использования топлива (3–5 лет), а также малые запасы урана-235.

Решением существующих проблем является использование регенерированного урана для изготовления REMIX-топлива: обогащенный по изотопу урана-235 в виде диоксида урана распределяется в оксидной матрице с высокой теплопроводностью и малым сечением захвата нейтронов [1].

Применяемые в настоящее время методы получения оксидных композиций, в частности золь-гель метод, и методы раздельного получения оксидов и последующего механического смешивания обладают рядом существенных недостатков, такими как неравномерное распределение фаз в полученных композициях, многостадийность процессов, а также необходимость применения большого количества реагентов и энергии [2].

К преимуществам синтеза оксидных композиций из водно-органических нитратных растворов с применением плазменных технологий можно отнести одностадийность процесса, высокую скорость протекания реакции, а также гомогенное распределение фаз в полученных оксидных порошках [3].

В работе представлены результаты исследований процесса плазмохимического синтеза ОК «UO₂-MgO» из диспергированных модельных растворов ВОНР, включающих горючий компонент, а также водные нитратные растворы неодима (вместо урана) и магния.

Подготовленные растворы ВОНР подавались через диспергатор в реактор плазменного модуля на базе ВЧФ-плазмотрона с расходом 300 л/ч, где в воздушно-плазменном потоке при рабочей температуре 1100–1300 °С осуществлялся синтез ОК, далее в узле «мокрой» очистки (УМО) происходило их резкое охлаждение («закалка») с образованием водных суспензий ОК, которые отстаивали, фильтровали и прокачивали в течение 20 минут при температуре 130 °С.

В результате проведенных расчетов и сравнения с экспериментальными данными показано, что повышение объемного содержания матрицы (оксида магния) в составе диоксида урана до 5%, 10% и 15% приводит при температуре 1400 К к увеличению коэффициента теплопроводности ОК в 1,35, 1,40 и 1,50 раза соответственно, а при температуре 1600 К – в 1,47, 1,53 и 1,70 раза соответственно.

В ходе исследований проводились лазерная дифракция водных суспензий ОК, сканирующая электронная микроскопия, БЭТ-анализ и рентгенофазовый анализ полученных порошков.

Установлено, что при расходе воды на «закалку» ОК (2,8 кг/с) и частоте вращения ротора диспергатора (35 Гц), увеличение содержания матрицы (MgO) в составе ОК «Nd₂O₃-MgO» (5%, – 50%), ведет к образованию частиц ОК в водных суспензиях размером 13,0–4,7 мкм соответственно. При этом удельная поверхность полученных порошков составляет 19,5–11,2 м²/г а размер «кристаллитов» в частицах ОК – 39–123 нм., что подтверждает возможность плазмохимического синтеза наноразмерных ОК из диспергированных растворов ВОНР.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-19-00136).

Литература

1. Алексеев С.В., Зайцев В.А., Толстоухов С.С. Дисперсионное ядерное топливо. М.: Техносфера, 2015. 248 с.
2. Туманов Ю.Н. Плазменные и высокочастотные процессы получения и обработки материалов в ядерном топливном цикле: настоящее и будущее. М.: Физматлит, 2003. 759 с.
3. Novoselov I.Yu., Karengin A.G., Babaev R.G. Simulation of Uranium and Plutonium Oxides Compounds Obtained in Plasma // AIP Conference Proceedings. 2018. V. 1938. P. 1–5.

УДК 621.039

Влияние внешних динамических сил на процесс естественной циркуляции в судовой ядерной энергетической установке

А.М. Самойлов, А.А. Сатаев, А.А. Блохин, В.В. Андреев

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

К судовым ядерным энергетическим установкам предъявляются повышенные требования к безопасности и надёжности ввиду необходимости длительное время находиться в удалении от портовых баз. Как известно, процесс естественной циркуляции (ЕЦ) является одним из основных способов аварийного отвода тепла от активной зоны реактора, а значит, обеспечение стабильного протекания ЕЦ однозначно определяет безопасность установки в целом. Однако на судовую энергетическую установку во время эксплуатации непрерывно действуют периодические внешние силы, которые принято описывать термином «судовая качка». В таких условиях для процесса естественной циркуляции имеются следующие проблемы: неустойчивые режимы работы, малый расход и его флуктуации, срыв циркуляции [1]. Целью данной работы является выявить, каким образом судовая качка влияет на параметры естественной циркуляции.

Исследования проводились на стенде для испытаний на качку и статический крен гидравлических контуров с естественной циркуляцией [2]. Установка представляет собой модель одной из петель циркуляции реакторной установки и включает следующие основные элементы: обогреваемый участок (1), охлаждаемый участок (2), теплообменник коаксиального типа (3), механизм качания (4), бак запаса (5), подшипниковые опоры (6), пьезометр (7). В характерных точках трассы циркуляции установлены термодатчики (Т1 Т4).

Для описания процесса естественной циркуляции предлагается математическая модель, в основе которой лежит уравнение Бернулли. Так как на судно постоянно действуют внешние силы, оно меняет своё геометрическое расположение с определённым периодом и амплитудой. Это приводит к периодическому (в первом приближении гармоническому) изменению пьезометрического давления, т.е. появлению нивелирного напора:

$$\frac{\rho \cdot w^2}{2} + \rho \cdot g \cdot h(\varphi) + P = \text{const}, \quad (1)$$

здесь ρ – плотность среды, w – скорость теплоносителя, P – гидростатическое давление, $h(\varphi)$ – пьезометрическая высота.

$$h(\varphi) = h_{\max} \cdot \sin\left(\frac{2\pi \cdot t}{T}\right), \quad (2)$$

здесь h_{\max} – амплитуда, t – текущее время, T – период колебаний.

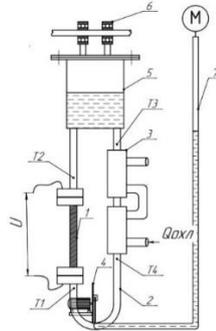


Рис. 1. Принципиальная схема стенда

Математическая модель дополняется уравнением сохранения количества движения и уравнениями теплового баланса для обогреваемого и охлаждаемого участков.

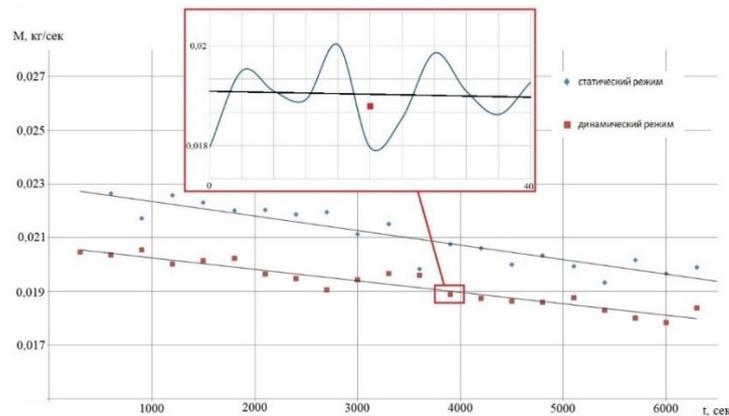
$$\frac{d}{dt}(L_{\text{общ}} \cdot M) = \frac{\pi \cdot d^2}{4} (H_{\text{ец}} - H_{\text{пот}}) \quad (3)$$

$$l_1 \frac{\pi \cdot d^2}{4} C_p \cdot \rho \frac{d\bar{t}_1}{d\tau} = N + M \cdot C_1 \cdot t_1 - M \cdot C_1 \cdot t_2 \quad (4)$$

$$l_3 \frac{\pi \cdot d^2}{4} C_p \cdot \rho \frac{d\bar{t}_3}{d\tau} = M \cdot C_1 \cdot t_3 - M \cdot C_1 \cdot t_4 - kF(\bar{t}_3 - t_{\text{охл}}) \quad (5)$$

здесь ρ – плотность теплоносителя, M – массовый расход среды, d – диаметр трубопровода, C_p – удельная теплоёмкость, $H_{\text{ец}}$ – напор ЕЦ, $H_{\text{пот}}$ – гидравлические потери, N – подведённая мощность, kF – коэффициент и площадь теплопередачи, t_i – температуры в характерных точках трассы, $t_{\text{охл}}$ – температура охлаждающей воды, l_1 и l_3 – длины обогреваемого и охлаждаемого участков, $L_{\text{общ}}$ – общая длина трассы циркуляции.

Проведя серию подобных экспериментов, удалось получить следующие зависимости для массового расхода среды в соответствии с математической моделью:



На основе полученных зависимостей можно сделать вывод, что в случае качки происходит снижение расхода теплоносителя и прослеживаются его флуктуации. Интерпретируя полученные результаты на судовую энергетическую установку, такого рода воздействия могут привести к недостаточности отвода тепла в аварийной ситуации, а длительная работа на ЕЦ может привести к снижению ресурса конструктивных элементов ввиду термоциклических нагрузок, причиной которых является флуктуация расхода.

Литература

1. Митенков Ф.М., Моторов Б.И. Механизмы неустойчивых процессов в тепловой и ядерной энергетике. М.: Атомиздат, 1981. 88 с.

2. Патент на полезную модель № 206341 U1 Российская Федерация, G01N 25/58 (2006.01). Стенд для испытаний на качку и статический крен гидравлических контуров с естественной циркуляцией : № 2021111425 : заявл. 22.04.2021 : опубл. 06.09.2021 / В. В. Андреев, А. А. Сатаев, А. М. Самойлов, А. А. Блохин.
УДК 53.01

Определение критического размера линзовидной поры для её движения по механизму испарение-конденсация

П.А. Аверченко¹, М.В. Хорохорин¹, О.В. Хоружий²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В градиенте температуры возможно движение пор по механизму испарения-конденсации. При этом у горячей стороны поры возникает большее давление паров, чем у холодной, перенос вещества по объёму поры за счёт относительно быстрой газовой диффузии и смещение поры как целого в область высоких температур.

Эффект проявляет себя при достаточно высоком давлении пара (для оксидного топлива это соответствует температурам $T > 1600 \div 1700$ °С). Важным следствием миграции пор по данному механизму является рекристаллизация топливной таблетки с образованием т.н. колончатых зёрен и очистка матрицы от газовых продуктов деления. Диаметр холодной части поры задаёт размер формируемых зёрен. Это обуславливает важность понимания всех параметров, определяющих данный процесс.

Согласно результатам послереакторных исследований [1, 2] при движении пора приобретает несимметричную форму с выпуклой горячей и плоской холодной поверхностями. Снижение давления паров у выпуклой поверхности приводит к замедлению движения, а при превышении эффектом кривизны эффекта температуры движение поры становится невозможным.

Чем больше размер поры, тем больше перепад температуры по её поверхности и тем меньше эффект кривизны поверхности на давление паров. Соответственно, возникает критический минимальный размер поры, требуемый для начала её движения по механизму испарение-конденсация и определяющий минимальный размер формируемых колончатых зёрен. Работа посвящена вычислению этой величины и её зависимости от параметров облучения и свойств топлива.

Аппроксимируя форму поры критического размера сферическим сегментом и используя равенство давления паров у противоположных её сторон, получено аналитическое выражение для радиуса холодной поверхности, что позволило провести анализ его зависимости от параметров задачи.

Для реалистичных условий облучения оксидного топлива в реакторах на быстрых нейтронах [1] выполнена оценка величины критического радиуса. Полученные значения хорошо согласуются с наблюдаемым экспериментально минимальным размером колончатых зёрен [1, 3].

Литература

1. *Olander D.R.* Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements: solutions to problems. California UniV., Berkeley (USA). Dept. of Nuclear Engineering, 1976. № TID-26711-P2.
2. *Ronchi C., Sari C.* Swelling analysis of highly rated MX-type LMFBR fuels. I. Restructuring and porosity behaviour // *Journal of Nuclear Materials*. 1975. Т. 58, № 2. С. 140–152.
3. *Дегальцев Ю.Г., Пономарев-Степной Н.Н., Кузнецов В.Ф.* Поведение высокотемпературного ядерного топлива при облучении М.: Энергоатомиздат, 1987. 208с.

УДК 551.577.7

Исследование моделей влажного осаждения аэрозолей, возникающего при радиоактивном выбросе в атмосферу

А.С. Осадчий

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Одним из ключевых параметров, влияющих на формирование поверхностных выпадений при авариях на ОИАЭ с выбросами РВ в атмосферу – влажное осаждение. Влажное осаждение принято разделять на внутриоблачное и подоблачное вымывание, в настоящей работе будет рассмотрено только подоблачное вымывание, так как при моделировании переноса в ближней зоне выброса, роль внутриоблачного вымывания в большинстве случаев оказывается незначительной [1]. Прохождение

выброса через среду, состоящую из движущихся к поверхности земли гидрометеоров вызывает ряд процессов взаимодействия. Ключевыми процессами, вызывающими осаждение аэрозольных частиц, являются: Броуновская диффузия, инерционный захват и зацепление частицы гидрометеором. Также известно, что диффузиофорез, термофорез и электростатическое взаимодействие могут привести к осаждению аэрозолей. Помимо описания физических процессов, необходимо учитывать распределение гидрометеоров по размерам, как показали исследования [2], переход между монодисперсной и полидисперсной системой представления осадков вызывает изменение постоянной вымывания до нескольких порядков. В отличие от сухого осаждения [3] процесс влажного вымывания происходит по вертикальному слою атмосферы и при наличии средних или сильных по интенсивности осадков будет доминирующим. Авария на АЭС Фукусима-1 показала, что интегральные модели описания вымывания, принятые в кодах, не описывают данные измерений [4].

В связи с этим целью настоящей работы является определение моделей физических процессов, наилучшим образом описывающих влажное осаждение. Для этого из работ по исследованию влажного осаждения [5, 6, 7] были определены экспериментальные данные, затем выбраны модели влажного осаждения, учитывающие различные физические процессы, гранулометрический состав аэрозолей, а также распределение гидрометеоров по размерам.

Основным параметром, определяющим подоблачное вымывание аэрозольных частиц в моделях атмосферного переноса, является коэффициент подоблачного вымывания [8], Λ (1/с):

$$\frac{dC(d)}{dt} = -\Lambda \cdot C(d)$$

где $C(d)$ – концентрация аэрозольных частиц диаметра d в исследуемом объеме, $1/\text{м}^3$, t – время взаимодействия осадков и аэрозоли, с.

С учетом распределения по размерам дождевых капель коэффициент подоблачного вымывания для частицы диаметром d представляется в виде:

$$\Lambda(d) = \int_0^{\infty} E(D, d) V(D) \frac{\pi D^2}{4} N(D) dD$$

где $E(D)$ – эффективность захвата капель, $V(D)$ – предельная скорость капли, м/с, $N(D)$ – функция распределения дождевых капель по размерам, $1/\text{м}^4$, D – диаметр капли, м.

Для проведения численного анализа были выбраны следующие модели описания влажного осаждения:

- Для эффективности захвата капель: модель Slinn 1984 [7] $E(d, D) = E_{Br} + E_{int} + E_{ine}$, где E_{br} , E_{int} , E_{ine} – эффективности диффузионного, инерционного захвата и захвата за счет зацепления соответственно; модель Припачкина 2020 [8] $E(d, D) = 1 - e^{-\gamma}$, где γ – коэффициент, зависящий от макроскопических параметров среды (~ 1.0), $\eta = \eta_{sr} + \eta_D + \eta_{DK}$ – коэффициенты инерционного, диффузионного захвата и захвата за счет зацепления; модель Slinn 1984+ [9], учитывающая влияние таких физических процессов как диффузиофорез и термофорез $E(d, D) = E_{Br} + E_{int} + E_{ine} + E_{th} + E_{dph}$, где E_{th} и E_{dph} вклады термофореза и диффузиофореза в эффективность E .
- Для описания предельной скорости капли были выбраны 4 эмпирические параметризации приведенные в работе [2]: Kessler 1969 – $V(D) = 1300D^{0.5}$; Atlas 1977 – $V(D) = 1767D^{0.67}$; Willis 1984 – $V(D) = 4854 \cdot e^{-1.95D}$; Best 1950 – $V(D) = 958 \cdot (1 - e(-\frac{D}{0.171})^{1.147})$, где D – диаметр капли, мм.
- Для описания распределения гидрометеоров по диаметрам были выбраны: экспоненциальное распределение Marshall and Palmer, а также логнормальное распределение Feingold and Levin, параметры которых приведены в работе [2].

В результате комбинаторного объединения моделей эффективности захвата капель, размерного распределения и предельной скорости капель, для тестирования моделей влажного осаждения получено 24 комбинации моделей. Так как значения коэффициента подоблачного вымывания Λ лежат в диапазоне от $2 \cdot 10^{-7}$ до $3 \cdot 10^{-3}$, 1/с (при изменении диаметра аэрозольных частиц d от 0,1 до 10 мкм), было принято решение разбить область диаметров d на 2 характерные группы: мелкодисперсные 0,1 – 1,0 мкм и грубодисперсные 1,0 – 10,0 мкм. На основе статистического анализа было получено, что в мелкодисперсной области моделируемые результаты имеют систематическую ошибку $|FB| < 0.8$, в грубодисперсной $|FB| < 0.4$; случайная ошибка $NMSE$ оказалась выше для мелких частиц $\sim 2 \cdot 10^6$ против $3 \cdot 10^3$ для крупной; коэффициент корреляции Пирсона составляет ~ 0.5 для крупных частиц и в пределах от 0,1 до 0,3 для меньших; значение $FAC10 = 1,0$ для мелкодисперсной группы, за исключением

моделей, учитывающих влияние термо- и диффузионных процессов и составляет $\sim 0,70$ для грубодисперсных частиц.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что модели влажного осаждения с достаточной точностью позволяют описывать экспериментальные данные, тем не менее результаты сильно зависят от условий эксперимента. Так как комбинации моделей имеют как положительные, так и отрицательные значения FB , а также широкую дисперсию $NMSE$ выбор определенных комбинаций дает возможность для построения мультимодельного ансамбля с несмещенной оценкой.

Литература

1. Припачкин Д.А., Будыка А. К. Влияние параметров аэрозольных частиц на их вымывание из атмосферы дождевыми каплями, Известия РАН. Физика атмосферы и океана, 2020, Т. 56, № 2, стр. 203–209.
2. Wang X, Zhang L, [et al], Uncertainty assessment of current size-resolved parameterizations for below-cloud particle scavenging by rain, Atmos. Chem. Phys., 10, 5685–5705.
3. Seinfeld J, and Pandis S, 2016, Atmospheric Chemistry and Physics, 3rd ed., 1152 P.,
4. Korsakissok A. Atmospheric dispersion and ground deposition induced by the Fukushima Nuclear Power Plant accident A local-scale simulation and sensitivity study. Atmos. Environ., 2013, 70, P. 267–279.
5. Sparmacher H. et al. 1993, Below-cloud scavenging of aerosol particles: particle-bound radionuclides. Experimental. Atmospheric Environment 27A (4), 605–618.
6. Baklanov, B. et al. 2001, Parameterization of radionuclides deposition in atmospheric long-range transport modeling. Physics and Chemistry of the Earth B 26 (10), 787–799.
7. Slinn W. G. N., Precipitation scavenging, in: Atmospheric Sciences and Power Production – 1979, chap. 11, Division of Biomedical Environmental Research, U.S. Department of Energy, Washington, D.C., 1983.
8. Andronache C, et al. Scavenging of ultrafine particles by rainfall at a boreal site: observations and model estimations, Atmos. Chem. Phys., 6, 4739–4754, doi:10.5194/acp-6-4739-2006, 2006.

УДК 519.168, 519.85, 621.039.7

Применение методов комбинаторной оптимизации в области обращения с РАО

Д.Д. Шишкина^{1,2}, С. Т. Казиева²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Задачи формирования партий отработавших тепловыделяющих сборок (ОТВС) на переработку для получения упаковок боросиликатного стекла (БСС) с требуемыми тепловыми характеристиками актуальны в контексте создания инфраструктуры для обращения с радиоактивными отходами (РАО). В более детальной постановке такие задачи возникают при планировании загрузки упаковок БСС в пункт глубинного захоронения радиоактивных отходов (ПГЗРО).

В данной работе рассматривается задача формирования партий ОТВС с учетом максимально допустимого значения тепловыделения БСС при загрузке в ПГЗРО и предельного количества ОТВС на одну упаковку БСС. Формулировка и решение соответствуют задаче линейного программирования.

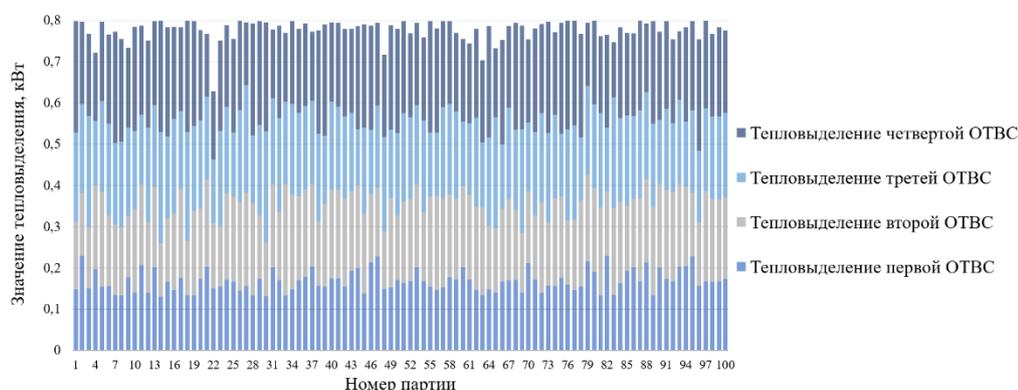


Рис. 1. Зависимость значения тепловыделения от номера партии

Для решения задачи были введены следующие обозначения: N — количество ОТВС, готовых к переработке, M — количество партий ОТВС (на выходе после переработки одной партии ОТВС получаются упаковки БСС с одинаковыми тепловыделениями), $S = \{P_1, \dots, P_N\}$ — набор значений остаточного тепловыделения ОТВС, P_{\max} — максимальное допустимое значение тепловыделения упаковки БСС, равное 0,6 кВт согласно [1].

Переменной, поступающей на вход оптимизационного алгоритма, является массив x , такой что $x_{ij} \in \{0,1\}, \forall i = \{1, \dots, M\}, j = \{1, \dots, N\}$, причем если сборка j назначена контейнеру i , то $x_{ij} = 1$, иначе $x_{ij} = 0$. В задаче используется три условия:

$$\sum_{j=1}^M x_{ij} = 1, \forall i \in \{1, \dots, N\}, \quad (1)$$

$$\sum_{i=1}^N x_{ij} = K, \forall j \in \{1, \dots, M\}, \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^N x_{ij} \cdot P_i \leq P_{\max} \cdot \frac{K}{2}, \forall j \in \{1, \dots, M\}, \quad (3)$$

где выражение (1) означает размещение ОТВС по партиям без повторений, выражение (2) отвечает за размещение в каждом контейнере заданного числа ОТВС K , выражение (3) показывает, что в каждой упаковке суммарное тепловыделение не превышает заданного значения P_{\max} (с учетом того, что соотношение масс одной упаковки БСС и одной ОТВС примерно будет равно 2:1 согласно [1]).

Задача оптимизации состоит в том, чтобы минимизировать абсолютное отклонение значения тепловыделения по всем контейнерам от их усредненного значения, и таким образом получить равномерное распределение тепловыделения по всем контейнерам:

$$\min \sum_{j=1}^M \left| \frac{\sum_{i,j=1}^{N,M} x_{ij} \cdot P_i}{M} - \sum_{i=1}^N x_{ij} \cdot P_i \right|. \quad (4)$$

В качестве исходных данных для оптимизации использовалось тепловыделение ОТВС на момент перед их переработкой, оцененное с применением расчетного кода TRACT [2] на основании паспортных данных ОТВС ВВЭР-1000 (дата выгрузки из активной зоны, выгорание) [1].

На начальном этапе была рассмотрена упрощенная постановка задачи на урезанном наборе данных. В ней необходимо из $N = 600$ ОТВС выбрать 400 ОТВС, и разложить их по $M = 100$ партиям, в каждой партии $K = 4$ ОТВС, согласно выражению **Ошибка! Источник ссылки не найден.**

$P_{\max} \cdot \frac{K}{2} = 1,2$ кВт. Упрощенная целевая функция записывается, как:
EMBED Equation.DSMT4

$$\sum_{j=1}^M \left| P_{cp} - \sum_{i=1}^N x_{ij} \cdot P_i \right|, \quad (5)$$

где $P_{cp} = 0,8$ кВт — заданное значение тепловыделения, по которому усредняются значения тепловыделений во всех партиях.

Для решения задачи линейного программирования использовался алгоритм Кармаркара [3] из пакета Google OR-Tools [4]. Результаты (зависимости значения тепловыделения от номера партии) изображены на рис. 1.

В дальнейшем планируется поэтапно переходить к полному набору данных и более реалистичной постановке задачи: например, к учету того, что упаковки БСС, образующиеся после переработки

ОТВС, не будут сразу загружаться в ПГЗРО, соответственно, их тепловыделения должны пересчитываться на соответствующие моменты времени. Также планируется сравнить результаты решения поставленной задачи, полученные различными оптимизационными методами.

Литература

1. *Блохин П.А. [и др.]*. О возможностях управления характеристиками боросиликатного стекла при переработке ОЯТ ВВЭР-1000 на ОДЦ» ГХК» // Радиоактивные отходы. 2019. № 2. С. 49–57.
2. *Блохин А.И. [и др.]*. Возможности расчетного кода TRACT для решения задач характеризации радионуклидного состава РАО и ОЯТ // А.И. Блохин, П.А. Блохин, И.В. Сипачев / Радиоактивные отходы. 2018. № 2 (3). С. 95–104.
3. *Karmarkar N.* A new polynomial-time algorithm for linear programming / N. Karmarkar // *Combinatorica*. 1984. V. 4, № 4. P. 373–95.
4. *Perron L. et al.* OR-Tools 7.2. URL: <https://developers.google.com/optimization/> (access date: 20.10.2021).

УДК 621.039.534

Проблемные аспекты применения газовой системы компенсации объема в ядерной энергетической установке

Д.И. Новиков, А.А. Сатаев, А.М. Самойлов, В.И. Полуничев

НГТУ им. Р.Е. Алексеева

Современное развитие ядерной энергетики в нашей стране характеризуется пересмотром концепции строительства новых энергоблоков. Повышенное внимание уделяется атомным станциям малой мощности и плавучим энергоблокам, как перспективным источникам энергии, реакторная установка которых проектируется на основе референтных судовых технологий. Такие установки по своей сути являются коммерческими и к ним предъявляются повышенные требования по технико-экономическим показателям.

Опыт проектирования судовых ядерных энергетических установок (ЯЭУ) показывает, что в качестве системы компенсации давления целесообразно использовать всесторонне отработанную газовую систему компенсации. Однако применение такого типа системы неизбежно влечет за собой насыщение теплоносителя первого контура рабочим газом – азотом [1].

При нахождении установки в маневровых режимах, а также в режимах, свойственных всем ЯЭУ (режим ремонтного расхолаживания, выход на энергетический уровень мощности, снижение давления в системе первого контура), происходит неравновесное выделение растворенного газа на различных участках системы первого контура в соответствии с законом Генри [2].

Выделившийся газ имеет относительно низкую скорость растворения, что непременно приведет к его сепарации и концентрации в верхних полостях оборудования и приведет к нарушению нормального режима работы. Так, в системе очистки и расхолаживания выделившийся газ скапливается под крышкой теплообменника 1–3 контуров, затем неизбежно попадает в циркуляционный насос расхолаживания и, при определенной объемной доле, приводит к «срыву» насоса [3].

Газ также выделяется на теплообменных поверхностях, где температура достигает температуры насыщения, а именно в пристенном слое тепловыделяющего элемента (ТВЭЛ). Появление газовых пузырей приводит к преждевременной коррозии оболочек ТВЭЛа, поскольку мешает нормальному теплоотводу от поверхности, а отрываясь от неё, оставляет сухое пятно, что неизбежно приводит к термодинамическим нагрузкам. Последующее «схлопывание» газового пузыря приводит локальному гидроудару и микроповреждениям оболочки ТВЭЛ.

В рамках данной работы рассмотрены механизмы переноса теплоты через газовый пузырь посредством термокапиллярной конвекции и процессом испарения у основания пузыря и конденсации на его вершине. В результате рассмотрения опытных данных, приведенных в работе [2], при условии свободной конвекции образование газового пузыря увеличивает интенсивность теплоотдачи за счет термокапиллярной конвекции.

Для изучения теплоотдачи в газонасыщенном теплоносителе в условиях вынужденной конвекции был создан экспериментальный стенд со стержневым нагревателем и сепаратором для исключения попадания уже выделившегося газа в экспериментальный канал. В результате получено, что в условиях вынужденной конвекции в газонасыщенном теплоносителе выделение растворенного газа на поверхностях приводит к экранированию теплового потока и снижению интенсивности теплоотвода на $\approx 25\%$.

Литература

1. *Зверев Д.Л., Пахомов А.Н., Полуничев В.И., Вешняков К.Б., Кабин С.В.* Реакторная установка нового поколения РИТМ-200 для перспективного атомного ледокола // Атомная энергия. 2012. Т. 113, вып. 6. С. 323–328.
2. *Бараненко В.И.* Термодинамика и теплообмен в ЯЭУ с газонасыщенным теплоносителем / В.И. Бараненко, В.Г. Асмолов, В.С. Киров. – Москва: Энергоатомиздат, 1993. 272 с.
3. *Филимонов А.Ф., Полуничев В.И., Помысухина А.Е.* Газовыделение и газоперенос в оборудовании первого контура реакторной установки с газовой системой компенсации давления // Труды НГТУ им. Р.Е. Алексеева. 2019. № 3. С. 101–110.

Секция проблем квантовой физики, электрофизики, квантовой радиофизики и проблем физики и астрофизики

УДК 621.383.4

Выбор оптимального типа пассивирующего лиганда для фотодетекторов инфракрасного диапазона на основе коллоидных нанокристаллов HgSe

Д. Соколова^{1,2}, А.В. Кацаба^{1,2}, С.А. Амбровевич^{1,2}, В.Ф.Разумов^{1,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

³Институт проблем химической физики РАН

Фотодетекторы (ФД) инфракрасного (ИК) диапазона находят применения во многих сферах жизни человека [1–4]. Диапазон применения ИК ФД постоянно расширяется с развитием технологий. Однако их производство до сих пор остается дорогостоящим, а большинство ФД требуют охлаждения для достижения высоких рабочих характеристик. Применение коллоидных нанокристаллов для создания оптоэлектронных устройств, таких как ИК ФД, может устранить эти недостатки.

В настоящее время для создания ИК ФД используют нанокристаллы халькогенидов ртути или свинца: HgTe, HgSe, HgS, PbS и PbSe. Особое место в этом ряду занимает полупроводник HgSe. Данный материал представляет большой интерес для исследований и является перспективным для использования в ИК-фотодетекторах среднего диапазона, поскольку обладает сильным внутризонным поглощением между электронными уровнями 1Se и 1Pe в средней ИК-области [5]. Однако, кроме выбора полупроводникового материала нанокристаллов, важную роль играет выбор типа пассиватора нанокристаллов. Поскольку именно тип пассиватора нанокристаллов определяет электропроводные свойства ФД на основе нанокристаллов. С одной стороны, для эффективной работы ФД, пассиватор должен обеспечивать эффективный транспорт носителей заряда при наличии детектируемого излучения; с другой стороны, пассиватор должен препятствовать протеканию темного тока для уменьшения уровня шумов. В данной работе исследовано влияние типа пассивирующего лиганда на фотоэлектрические характеристики ИК ФД, изготовленных на основе коллоидных нанокристаллов HgSe. В качестве лигандов были выбраны: 1,2-этандитиол (EDT), роданид аммония (SCN), 1,2-бензедитиол (BeSH) и сера (S²⁻).

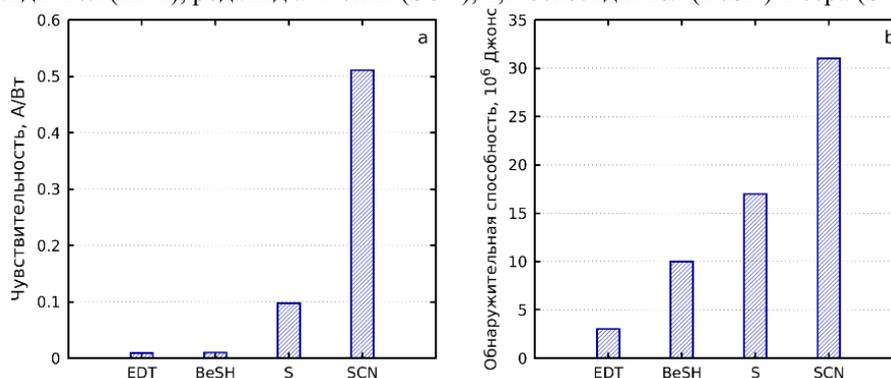


Рис. 1 Зависимость чувствительности (а) и обнаружительной способности (б) фотодетекторов на основе нанокристаллов HgSe от типа пассивирующего лиганда

Изготовленные образцы представляли собой стеклянные пластины с нанесенными гребенчатыми золотыми электродами: шаг гребенки составлял 20 мкм, расстояние между электродами – 10 мкм. Нанокристаллы со средним размером 7.5 нм наносились на электроды слой за слоем методом dip-coating. После нанесения каждого слоя нанокристаллов производилась замена лигандов.

В ходе работы были получены и проанализированы вольт-амперные характеристики ФД при наличии и отсутствии фотовозбуждения. Используя метод синхронного детектирования найдены зависимости чувствительности и удельной обнаружительной способности ФД от напряжения смещения, подаваемого на образец. Были определены рабочие напряжения, при которых достигались наилучшие эксплуатационные характеристики ФД. При использовании лигандов SCN рабочее напряжение составило 50 В, при дальнейшем увеличении напряжения

чувствительность образца уменьшалась. Такое поведение объясняется увеличением уровня шума при протекании тока через ФД.

В настоящей работе было установлено, что максимальные значения чувствительности и удельной обнаружительной способности образцов достигаются при замене лигандов на SCN (рис. 1а, б). Значения удельной обнаружительной способности и чувствительности при комнатной температуре составили 3.1×10^7 Джонс и 0.5 А/Вт, соответственно. Полученные значения чувствительности превосходят значения, представленные в литературе для ФД на основе HgSe, а значения удельной обнаружительной способности сопоставимы со значениями, полученными ранее [6, 7] для ФД на основе HgSe. Отметим, что в работе Мартинеза и др. [8] в качестве оптимальной лигандной замены для нанокристаллов HgTe были предложены BeSH и EDT.

Синтез нанокристаллов и изготовление образцов фотодетекторов было проведено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 18-29-20062 мк. Измерения фотоэлектрических характеристик образцов было проведено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 20-02-00222 А.

Литература

1. *Ettenberg M.A.* A little night vision // *Adv. Imaging.* 2002. V. 20. P. 29–32.
2. *Kovalenko M.V. et al.* Colloidal HgTe nanocrystals with widely tunable narrow band gap energies: from telecommunications to molecular vibrations // *Journal of the American Chemical Society.* 2006. V. 128, N 11. P. 3516–3517.
3. *Andrea De Iacovo, et al.* PbS colloidal quantum dot visible-blind photodetector for early indoor fire detection // *IEEE Sensors Journal.* 2017. V. 17, N 14. P. 4454–4459.
4. *Госсоп Ж.* Инфракрасная термография. Основы, техника, применение. М.: Мир, 1988. 416 с.
5. *Lhuillier, E. and Guyot-Sionnest, P.* Recent Progresses in Mid Infrared Nanocrystal Optoelectronics // *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics.* 2017. V. 23, N 5. P. 1–8.
6. *Deng Z., Jeong K.S., Guyot-Sionnest P.* Colloidal quantum dots intraband photodetectors // *ACS Nano.* 2014. V. 8, N 11. P. 11707–11714.
7. *Tang X., Fu Wu G., Lai K.W.* Plasmon resonance enhanced colloidal HgSe quantum dot filterless narrowband photodetectors for mid-wave infrared // *Journal of Materials Chemistry C.* 2017. V. 5, N 2. P. 362–369.
8. *Martinez B., et al.* Probing charge carrier dynamics to unveil the role of surface ligands in HgTe narrow band gap nanocrystals // *The Journal of Physical Chemistry.* 2017. V. 122, N 1. P. 859–865.

УДК 535.41, 535.42

Оценка пространственной когерентности рентгеновского лазера SACLA дифракционным методом

Д. Х. Панэке Агилера, И. А. Артюков

Физический Институт им. П. Н. Лебедева РАН

Целью работы являлась оценка пространственной когерентности рентгеновского лазера на свободных электронах на основе экспериментальных данных. При помощи картин дифракции, записанных на кристаллическом детекторе LiF [1] при взаимодействии излучения лазера со щелевой диафрагмой, решалась задача по определению степени когерентности и профиля интенсивности на выходе источника.

В качестве модели для источника бралась модель Шелла с профилем интенсивности, состоящим из суммы двух гауссовых функций. Тогда взаимную интенсивность [2] между точками x_1 и x_2 зададим следующим образом:

$$J(x_1, x_2) = \left[I_g^{(m)} \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right) + I_g^{(a)} \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right) \right] \exp \left(- \frac{(x_1 - x_2)^2}{2\xi^2} \right) \quad (1)$$

Взаимная интенсивность определяется радиусом когерентности ξ , который мы и хотим оценить, и профилем интенсивности. Интенсивность представлена в виде суммы двух гауссовых функций: основной гауссианы $I_g^{(m)}$, которая одинакова для всех картин дифракции и дополнительной $I_g^{(a)}$, которая отличается в разных экспериментах

$$I_g^{(m,a)}(x) = a \exp \left(- \frac{(x - b^{(m,a)})^2}{(c^{(m,a)})^2} \right) \quad (2)$$

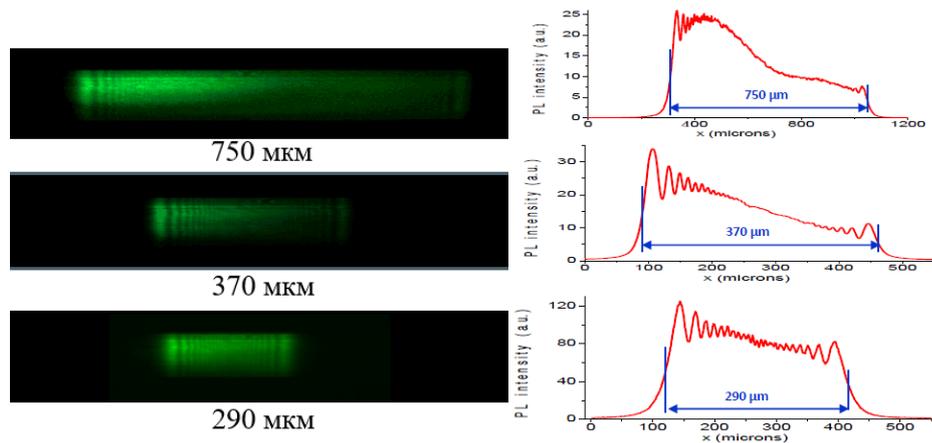


Рис. 1 Результат дифракции, зарегистрированный на кристалле LiF (слева), и соответствующее ему распределение интенсивности (справа)

Далее сравним картины дифракции из эксперимента с расчётными. Дифракцию от модельного источника определим, применив к функции взаимной интенсивности пропагатор Грина.

$$I(x, z) = \int_D J(x_1, x_2, z=0) G^*(x - x_1, z) G(x - x_2, z) dx_1 dx_2 \quad (3)$$

В результате сравнения расчетов с экспериментальными данными удалось определить основные параметры рентгеновского пучка SACLA, такие как радиус когерентности источника, размер источника и т.п. Радиус когерентности был найден путем его варьирования и нахождения минимума среднеквадратичного отклонения (СКО) амплитуд осцилляций в расчете и эксперименте (рис. 2)

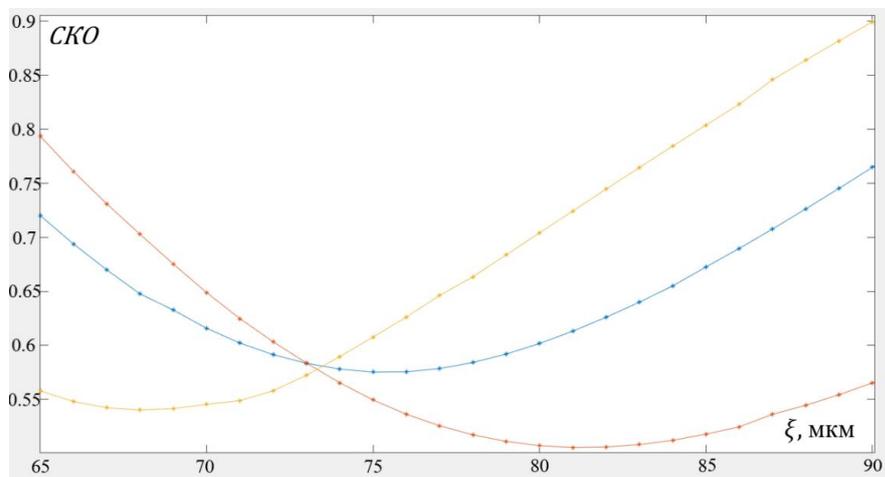


Рис. 2. СКО, рассчитанное для трех щелей: синий – 290 мкм, красный – 370 мкм, желтый – 750 мкм

Также путем подгонки профиля найдены коэффициенты гауссовых функций, с помощью которых задавался профиль интенсивности источника. Оцененные коэффициенты представлены в таблице.

Размер щели, мкм	$a_0^{(m)}$	$b_0^{(m)}$, мкм	$c_0^{(m)}$, мкм	$a_0^{(a)}$	$b_0^{(a)}$, мкм	$c_0^{(a)}$, мкм
750	49	33	108	18	132	109
370	49	33	108	19	101	109
290	49	33	108	16	92	107

Соответствующие расчеты исполнялись в пакете программ для технических вычислений MATLAB.

Литература

1. *Baldacchini G. et al.* Soft x-ray submicron imaging detector based on point defects in LiF // Review of scientific instruments. 2005. V. 76. N 11. P. 113104.
2. *Mandel L. et al.* Optical coherence and quantum optics. Cambridge university press, 1995.

УДК 533.361

Временные характеристики ВКР в комбинационно-активных порошковых средах

А.Н. Маресев^{1,2}, М.А.Шевченко¹, С.Ф. Уманская¹, Н.В.Чернега^{1,2}

¹ Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Исследования процесса случайной лазерной генерации света на неупорядоченных наноразмерных и субмикронных средах является весьма актуальной задачей в настоящее время [1], несмотря на то что с момента появления первой теоретической работы, посвященной этой теме [2], прошло более 50 лет. Одним из направлений развития исследований процесса случайной лазерной генерации является изучение комбинационных (рамановских) случайных лазеров, активная среда которых представляет собой порошок наноразмерных, субмикронных или микронных частиц с высокой комбинационной активностью. Главные особенности таких систем – это низкая пространственная когерентность излучения, узкая ширина линии, а также возможность широкой спектральной перестройки, определяемой спектральным смещением стоксовой компоненты. В работе [3] впервые экспериментально была реализована эффективная генерация на эффекте вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР) в системе субмикронных частиц сульфата бария при накачке лазерным излучением пикосекундного диапазона длительности. Данный тип ВКР-генераторов имеет высокий потенциал для практического использования, например, в микроскопии, для получения изображений с высоким временным разрешением [4].

В данной работе в качестве комбинационно активной среды использовался порошок нитрата бария с микронными размерами частиц. В качестве возбуждающего излучения использовалась вторая гармоника Nd:YAG лазера (0.53 мкм), работающего в режиме синхронизации мод. Длительность импульса – 30 пс, максимальная энергия в импульсе – 0.05 Дж. Была измерена временная динамика компонент ВКР при помощи монохроматора и стрик-камеры в случае воздействия пикосекундного импульса (рис. 1а). Зарегистрировано временное уширение рассеянного излучения накачки от 30 до 38 пс, а длительности первой и второй стоксовых компонент составили 32 и 22 пс соответственно, а антистоксовой – 19 пс. Эти экспериментальные данные неплохо согласуются с расчетами методом Монте-Карло [5], кроме одного момента: в эксперименте с увеличением энергии накачки задержка первой стоксовой компоненты линейно сдвигается во времени (рис. 1б). Это может быть связано с влиянием нелинейного показателя преломления среды в условиях усиления локального поля. Кроме того, путь излучения через среду может зависеть от энергии накачки.

Также был измерен средний свободный пробег фотонов в порошке с помощью эффекта когерентного обратного рассеяния, обусловленным слабой локализацией волн в неупорядоченной среде. Использовалась модель, изложенная в работе [6]. Полная вероятность достижения светом произвольной точки *B* из точки *A* равняется модулю суммы амплитуд вероятностей всевозможных путей в квадрате, то есть когерентной сумме. Однако из-за разности фаз путей все интерференционные слагаемые пропадают, поэтому эта полная вероятность будет аналогична некогерентной сумме, кроме случая, когда *A* и *B* совпадают. При совпадении начальной и конечной точки два пути, имеющие одинаковую траекторию, но противоположные по направлению будут конструктивно интерферировать. При применении этих соображений к обратному рассеянию можно сделать вывод, что свет будет рассеиваться по конусу с характерной угловой шириной λ/l и максимум интенсивности этого конуса будет в два раза больше, чем фоновая некогерентная засветка [7, 8]. В нашем эксперименте был получен угловой конус интенсивности обратного рассеяния (рис. 1в), из которого был найден свободный пробег фотона. Он оказался равен $l_{mfp} \approx 5.4$ мкм. Наличие конуса обратного рассеяния и размер полученной величины подтверждают слабую локализацию световых волн в порошке нитрата бария.

Отметим, что исключительно важным является вопрос зависимости энергетических характеристик ВКР в порошках (прежде всего эффективности преобразования и порога возбуждения) от размера частиц и степени монодисперсности. Предварительные измерения показали, что уменьшение размера ВКР активных частиц при сохранении условий возбуждения понижает порог ВКР и увеличивает эффективность преобразования. Детальные исследования в этом направлении планируется провести в ближайшее время.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 19-02-00750).

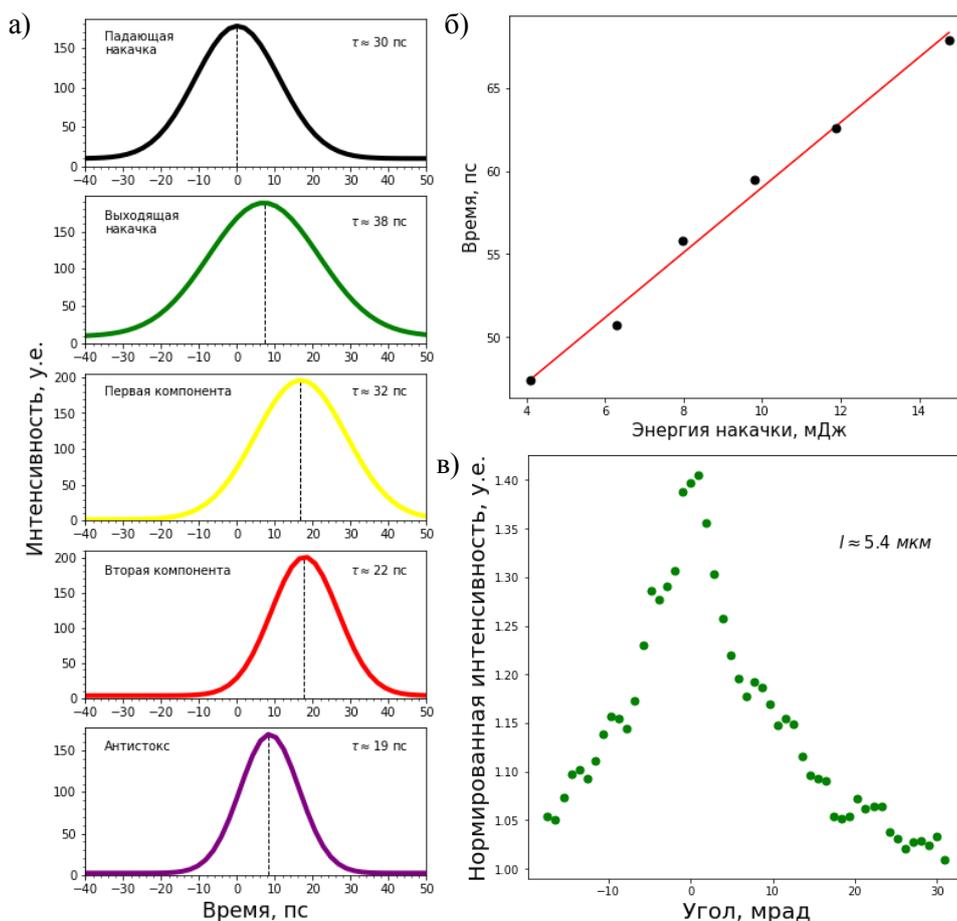


Рис. 1. а) Временные характеристики падающего и прошедшего через образец импульсов накачки, 1-й, 2-й и антистоксовой составляющих ВКР в порошке нитрата бария; б) задержка первой стоксовой компоненты от интенсивности лазерной накачки; в) конус обратного когерентного рассеяния порошка нитрата бария

Литература

1. Lu H. et al. Band-edge-enhanced tunable random laser using a polymer-stabilised cholesteric liquid crystal. *Liquid Crystals* 48.2 (2021): 255–262.
2. Letokhov V. S. Generation of light by a scattering medium with negative resonance absorption. *Sov. Phys. JETP* 26, 835–840 (1968).
3. Hokr B.H. et al. Bright emission from a random Raman laser. *Nature communications* 5.1 (2014): 1–5.
4. Hokr B.H. et al. Lighting up microscopy with random Raman lasing. *Real-time Measurements, Rogue Events, and Emerging Applications* V. 9732. International Society for Optics and Photonics, 2016.
5. Hokr B.H., Bixler J.N., Yakovlev V. V. Higher order processes in random Raman lasing. *Applied Physics A* 117.2 (2014): 681–685.
6. Van Albada M.P., Lagendijk A. Observation of weak localization of light in a random medium. *Physical review letters* 55.24 (1985): 2692.
7. Wolf P. E., Maret G. Weak localization and coherent backscattering of photons in disordered media. *Physical review letters* 55.24 (1985): 2696.
8. de Oliveira P. C., Perkins A.E., Lawandy N.M. Coherent backscattering from high-gain scattering media. *Optics letters* 21.20 (1996): 1685–1687.
9. Carman R. L. et al. Theory of Stokes pulse shapes in transient stimulated Raman scattering. *Physical Review A* 2.1 (1970): 60.
10. Basiev T.T., Osiko V. V. New materials for SRS lasers. *Russian Chemical Reviews* 75.10 (2006): 847.

Решение проблемы поиска собственных значений для изучения диокотронной неустойчивости в гиротронах

В. С. Захарова

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Гиротрон – это тип мазера на свободных электронах, который генерирует высокочастотное электромагнитное излучение за счет стимулированного циклотронного резонанса электронов, движущихся через сильное магнитное поле [1].

Диокотронная неустойчивость (также называемая неустойчивостью плазмы скользящего потока) является одной из наиболее распространенных неустойчивостей в ненейтральной плазме низкой плотности со сдвигом скорости потока [2], которая может возникать при распространении ненейтральных электронных пучков и слоев. Это может привести к возникновению электронных вихрей, которые напоминают сдвиговую динамическую неустойчивость жидкости Кельвина–Гельмгольца.

Проект был выполнен в Swiss Plasma Center (Lausanne), всемирно известной лаборатории в области исследований термоядерной плазмы с магнитным удержанием. В рамках своей миссии группа лаборатории занимается разработкой мощных высокочастотных источников, называемых гиротронами, которые используются для нагрева электронов в термоядерной плазме посредством электронно-циклотронного резонанса.

Для некоторых конструкций гиротронов и некоторых рабочих параметров в электронной пушке (рис. 1) наблюдались разрушающие токи между ускоряющими электродами [3, 4]. Основной гипотезой причины возникновения этих токов является наличие захваченных электронных облаков из-за наличия скрещенных электрического и магнитного полей в области электронной пушки. Эти облака подвержены диокотронным неустойчивостям, которые могут вызвать внезапное высвобождение части или всего электронного облака.

Основная цель представленной работы – реализовать численный алгоритм поиска собственных значений для исследования диокотронной неустойчивости. В работе рассматривается равновесие осесимметричного электронного облака, захваченного скрещенными электрическим и магнитным полями в коаксиальной камере (рис. 2, [5]).

Были проанализированы условия возникновения осевых возмущений путем получения и численного решения матричного полинома 6-го порядка с использованием встроенных функций Matlab.

Написанный код был проверен на корректность путем сравнения численного решения с аналитическим решением в частном случае для профиля плотности электронного облака в виде функции Хевисайда. Были получены удовлетворительные результаты, но наблюдалась численная неустойчивость, работа над которой еще предстоит.

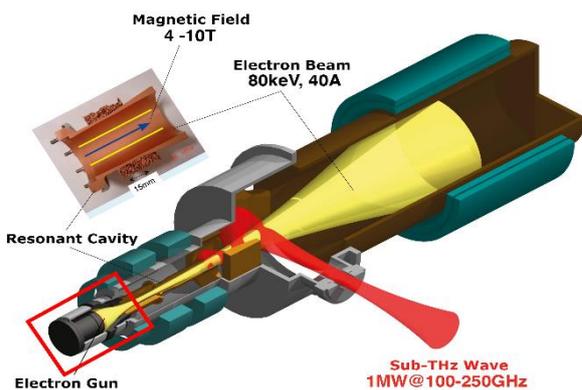


Рис. 1. Устройство гиротрона

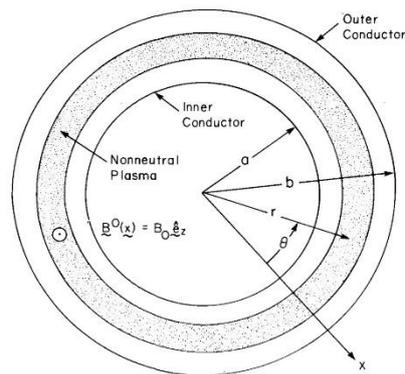


Рис. 2. Цилиндрическая геометрия задачи

Литература

1. *Wikipedia contributors*. Gyrotron // Wikipedia, the free encyclopedia, 2021. [Online; accessed 15-May-2021.]
2. *Pagonakis I.Gr., Piosczyk B., Zhang J., Illy S., Rzesnicki T., Hogge J.-P., Avramidis K., Gantenbein G., Thumm M., and Jelonnek J.* Electron trapping mechanisms in magnetron injection guns // *Physics of Plasmas*, 23(2):023105, 2016. 31.03.02; LK 01.
3. *Piosczyk B., Dammertz G., Dumbrajs O., Kartikeyan M.V., Thumm M.K., and Yang X.* 165-ghz coaxial cavity gyrotron. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 32(3):853–860, June 2004.
4. *Davidson Ronald C.* Physics of nonneutral plasmas / Ronald C. Davidson. Addison-Wesley, Redwood City, Calif, 1990.

Оптимизация загрузки атомов в магнитно-оптическую ловушку с использованием методов машинного обучения

Е.М. Азанов¹, М.О. Яушев^{1,2}, А.А. Головизин²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева

В современных исследованиях широко используются ансамбли из холодных атомов. Многоатомные взаимодействия в таких ансамблях приводят к динамике, исключающей точный аналитический расчет оптимальных параметров охлаждения и захвата. Использование машинного обучения в сфере оптимизации процесса охлаждения может решить эту проблему.

В работе [2] авторы продемонстрировали увеличение оптической глубины формируемого облака холодных атомов рубидия на 80% с помощью варьирования частот, охлаждающего и перекачивающего излучений, а также тока катушек магнитно-оптической ловушки (МОЛ) с применением глубокой искусственной нейросети. Результатом была интуитивно не понятная последовательность изменений параметров, позволившая увеличить оптическую глубину на 80%.

В настоящей работе предлагаются оптимизации работы МОЛ атомов тулия, описанная в работе [1]. Для достижения максимальной эффективности перезахвата атомов из МОЛ в оптическую решетку на первом этапе будут минимизироваться одновременно температура и размер облака атомов. Параметрами, через которые будет происходить оптимизация, будут служить ток основных и компенсационных катушек, а также частота и интенсивность лазера вторичного охлаждения.

Оптимизация загрузки и перезахвата атомов в оптическую решетку позволит сократить «мертвое» время, что увеличит стабильность создаваемых компактных оптических часов.

Литература

1. *Golovizin A., Tregubov D., Mishin D., Provorchenko D., Kolachevsky N.* Efficient loading of thulium atoms in a compact MOT for a transportable optical clock URL: <https://arxiv.org/pdf/2105.02145.pdf>
2. *Tranter A.D., Slatyer H.J., Hush M.R., Leung A.C., Everett J.L., Paul K.V., Vernaz-Gris P., Lam P. K., Buchler B.C., Campbell G.T.* Multiparameter optimisation of a magneto-optical trap using deep learning, *Nature Communications* (2018).

Создание системы управления установкой компактных оптических часов

М.О. Яушев^{1,2}, Е.М. Азанов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева

В настоящей работе мы усовершенствовали систему управления установкой [1], объединив различные блоки электроники в один 19-дюймовый 3U-модуль под управлением одноплатового компьютера BeagleBone Black, который имеет два микропроцессора (PRU). Созданная нами система получилась гораздо дешевле доступных на рынке аналогов с широким набором удобно изменяемых параметров.

На рис. 1 изображена схема взаимодействия различных компонентов блока. Основными требованиями при разработке системы были возможности быстрого изменения различных параметров: токи в катушках, последовательность цифровых импульсов, амплитуда и частота радиочастотных сигналов, генерируемые DDS.

Работоспособность и удобство разработанного электронного блока уже были протестированы – было успешно осуществлено первичное и вторичное охлаждение атомов тулия в компактной системе. Мы также рассчитываем, что созданный электронный блок позволит реализовать оптимизацию загрузки атомов в магнитно-оптическую ловушку и оптическую решетку, используя методы машинного обучения, предложенные в работе [2].

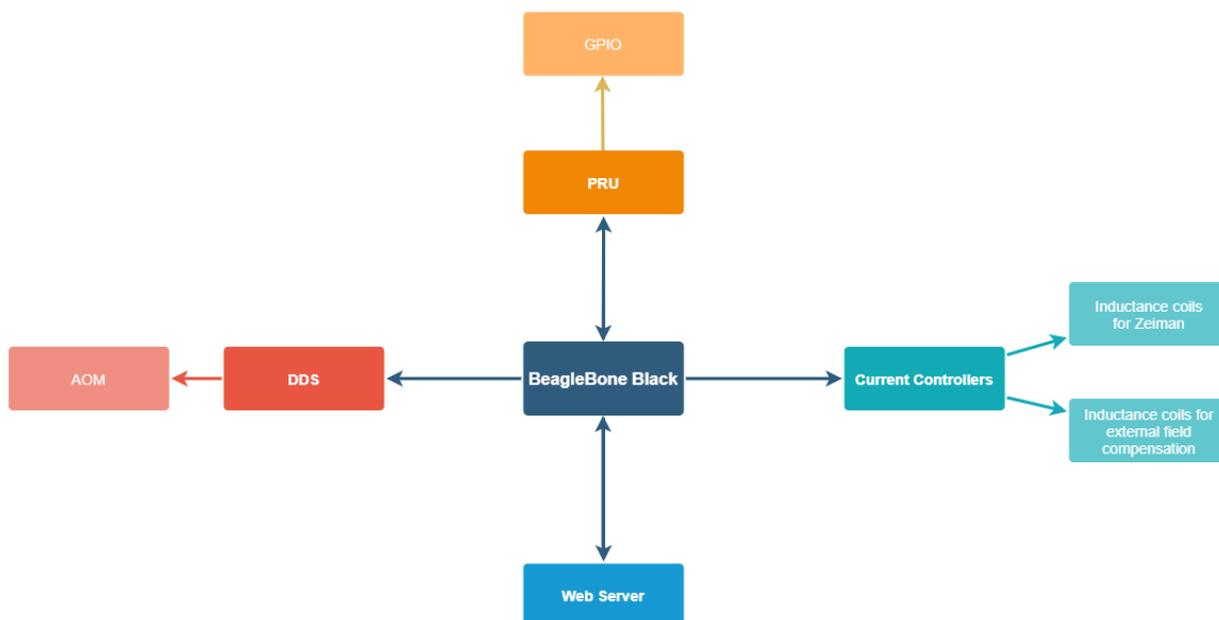


Рис. 1

Литература

1. Golovizin, D. Tregubov, D. Mishin, D. Provorchenko, N. Kolachevsky. Efficient loading of thulium atoms in a compact MOT for a transportable optical clock.
2. A.D. Tranter, H.J. Slatyer, M.R. Hush, A.C. Leung, J.L. Everett, K.V. Paul, P. Vernaz-Gris, P. K. Lam, B.C. Buchler & G.T. Campbell Multiparameter optimisation of a magneto-optical trap using deep learning, Nature Communications (2018).

УДК 533.17

Измерение энергии активации метано-воздушных смесей методом тонковолоконной пирометрии

А.Д. Морошкина^{1,2}, В.В. Губернов², В.В. Миславский², Т.П. Мирошниченко²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Получена из экспериментальных данных энергия активации метано-воздушной смеси, истекающей из плоской пористой горелки при нормальных условиях. По закону Аррениуса:

$$k = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right), \quad (26)$$

где k – скорость реакции, E_a – энергия активации, T – температура, A – предэкспонента. Измерение температуры проводилось с помощью тонкой нити накаливания из карбида кремния (SiC) диаметром $d = 15$ мкм, помещенной в пламя, и тепловизора OPTRIS PI. Пересчет из температуры нити T_f в температуру газа T_g производился по формуле [1]:

$$T_g = T_f + \frac{\varepsilon \sigma T_f^4}{h_c}, \quad (27)$$

где σ – константа Стефана–Больцмана, ε – излучательная способность, h_c – коэффициент, описывающий теплообмен нити и газа. Результаты представлены на (рис. 1), где изображена зависимость температуры от высоты над горелкой, максимум T_b соответствует температуре, близкой к температуре при адиабатическом горении. Экспериментальные данные сравнили с численными расчетами для адиабатического процесса и для горения с учетом тепловых потерь. Расчеты проведены в рамках модели с детальным механизмом реакции GRI3.0 [2].

От скорости реакции удобно перейти к скорости истечения смеси из горелки [3]:

$$u = C \exp\left(-\frac{E_a}{2RT_b}\right), \quad (28)$$

она рассчитывается из объёмного расхода газа, измеряемого по регуляторам расхода Bronkhost Elflow. Построив график зависимости $\ln u \left(-\frac{1}{2RT_b}\right)$ (рис. 2), находим энергию активации $E_a = 283 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$. Полученные данные хорошо согласуются с данными из литературы [4].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 21-13-00434.

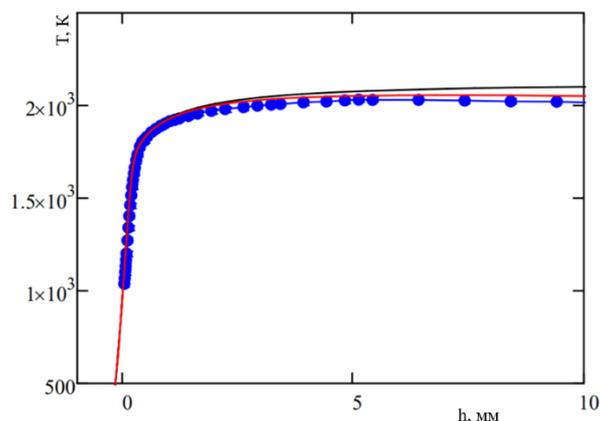


Рис. 1. Зависимость температуры от высоты над горелкой для смеси $Q_{\text{CH}_4} = 0.258 \frac{\text{л}}{\text{мин}}$, $Q_{\text{air}} = 2.598 \frac{\text{л}}{\text{мин}}$. Точками обозначены экспериментальные данные, черной линией – численный расчёт адиабатического процесса, красной – численный расчёт процесса с учетом тепловых потерь

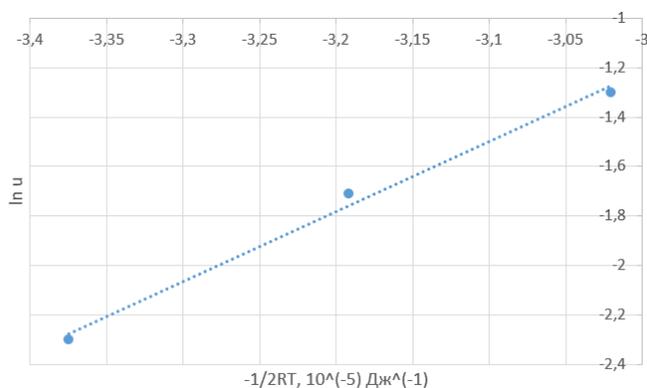


Рис. 2. Характерная зависимость $\ln u \left(-\frac{1}{2RT_b}\right)$. Наклон графика определяет энергию активации

Литература

1. Vilimpoc, LP Goss, B Sarka Spatial temperature-profile measurements by the thin-filament-pyrometry technique // Optics letters, 1988 // osapublishing.org.
2. G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Gardiner, Jr, V. V. Lissianski, Z. Qin, Gri-mech 3.0, 1999, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001021809390078H>.
3. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Г.М. Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва.
4. RW Francisco Jr, AAM Oliveira Simultaneous measurement of the adiabatic flame velocity and overall activation energy using a flat flame burner and a flame asymptotic model // Experimental Thermal and Fluid Science, Elsevier, 2018.

Обобщение формулы квазистатического приближения для дипольной поляризуемости наночастиц

А. В. Мекиун^{1,2}, А. Д. Кондорский²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Нанопотоника в настоящее время широко исследуемая область современной физики. Одной из важных задач теоретической нанопотоники является проектирование разного рода наноантенн для управления рассеянным светом [1]. Одним из удобных подходов для моделирования таких систем является метод дискретных диполей (DDA). Суть этого метода состоит в представлении моделируемой системы набором взаимодействующих диполей с поляризуемостями, описывающими свойства материалов, составляющих наносистему. Чем более крупный объект или составная часть системы может быть описана одним диполем, тем быстрее происходит расчет методом DDA. Задачей настоящей работы являлся поиск аналитических выражений для дипольной поляризуемости наночастиц сферической формы с размерами, превышающими величины, для которых применимы обычные квазистатические выражения.

Точное аналитическое решение задач рассеяния электромагнитных волн имеется для чрезвычайно узкого класса наночастиц. Для сфер существует аналитическая теория Ми [2]. Однако аналогичные теории даже для сфероидов оказываются чрезвычайно громоздкими. Поэтому на практике мы должны прибегать либо к численным расчетам, либо использовать различного рода приближения и модели.

Одним из нулевых приближений теории рассеяния и поглощения для наночастиц является квазистатическое приближение, суть которого состоит в решении статической задачи для системы в постоянном поле и последующей замене статической диэлектрической проницаемости на зависящую от частоты падающего света. С другой стороны, это же приближение можно получить, отбрасывая все моды в теории Ми кроме дипольной, а также пренебрегая рассеянием по сравнению с поглощением, что для металлических наночастиц, даже достаточно маленьких по сравнению с длиной волны, совершенно не допустимо. Поэтому мы должны использовать более точную модель, взяв за основу поляризуемость шара в квазистатике, но с поправкой к проницаемости вещества исследуемой частицы. Затем приравняв вышеуказанную поляризуемость поляризуемости точной, рассчитанной по теории Ми, которая в свою очередь пропорциональна коэффициенту при дипольной моде в ряде для рассеянного поля. С учетом того, что диаметр наших наночастиц не превышает 100 нм., мы имеем возможность разложить точную формулу для поляризуемости, найти поправку к диэлектрической проницаемости вещества наночастицы и вычислить соответствующие поляризуемости, а также соответственно определить сечения и сравнить их с точными, рассчитанными по теории Ми рис. 1–2.

Преимущество данного подхода заключается в том, что он носит достаточно универсальный характер, то есть мы можем применить его и для расчета сечений наночастиц более сложных геометрий, поскольку поправка вносится только к диэлектрической проницаемости самого вещества. В частности, для сплюснутых и вытянутых сфероидов известны формулы квазистатического приближения, отличающиеся от формулы для поляризуемости сфер лишь геометрическим фактором. Введя в эти формулы поправку к диэлектрической проницаемости, мы можем относительно легко рассчитывать сечения рассеяния и поглощения сфероидов.

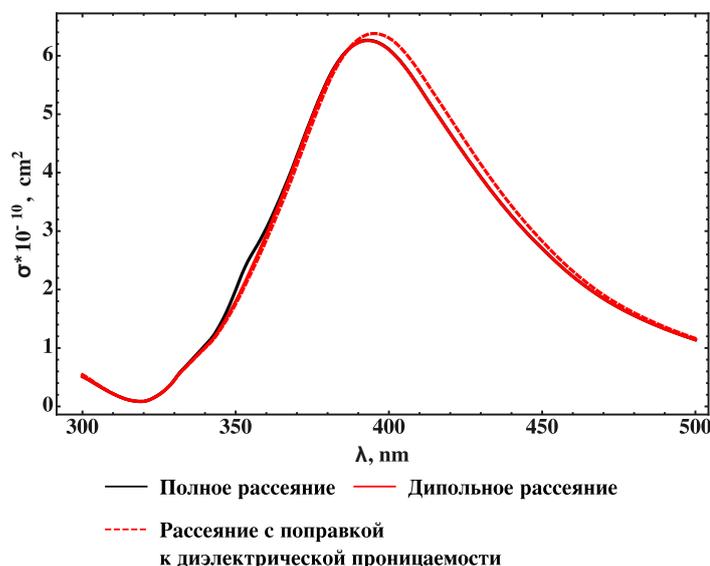


Рис. 1. Сравнение сечений рассеяния для серебряного шара радиусом 50 нм

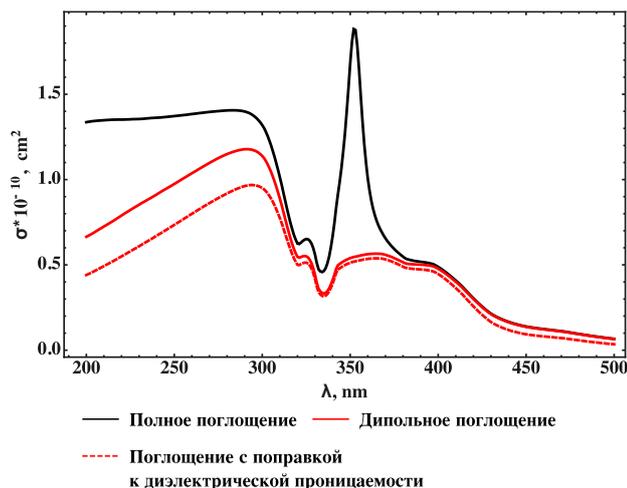


Рис. 2. Сравнение сечений поглощения для серебряного шара радиусом 50 нм

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 19-79-30086).

Литература

1. *Nannan L. et al.* Directional control of light with nanoantennas // *Adv. Optical Mater.* 2020, 200108.
2. *Борен К., Хафмен Д.* Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М.: Мир, 1986. 664 с.

УДК 533.922

Нелинейность импульсной катодолюминесценции кристалла LFS-3

М.В. Белов¹, Ю.Д. Заварцев², М.В. Завертяев¹, А.И. Загуменный², В.А. Козлов¹, С.А. Кутовой², Н.В. Пестовский¹, С. Ю. Савинов¹, Д. М. Тажитдинов^{2,3}, О. С. Шляхтун^{2,3}

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

²Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

³Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Нелинейность сцинтилляции заключается в непропорциональности между энергией, излучаемой некоторым объёмом вещества, и числом электронно-дырочных пар, созданных в этом объёме [1]. Это явление служит причиной непропорциональности выхода сцинтилляции при воздействии отдельных гамма-квантов разных энергий. В настоящей работе нелинейные свойства сцинтилляции кристалла LFS-3 исследуются при помощи измерения зависимости энергии люминесценции E_{lum} от энергии E_{beam} падающего пучка

LFS-3 – хорошо известный сцинтиллятор, широко используемый в ядерной медицине и физике высоких энергий [2]. На рис. 1 приведена кинетика катодолюминесценции LFS-3 на длине волны 405 нм и кинетика люминесценции этого же кристалла под действием гамма-квантов с энергией 661 кэВ, излучаемых радиоактивным источником ^{137}Cs , опубликованная в работе [2]. На рис. 2 приведена нелинейность КЛ кристалла LFS-3.

В работе было установлено, что в данной экспериментальной конфигурации [3] энергия электронного пучка прямо пропорциональна энергии рентгеновского излучения, генерируемого при прохождении пучка через воздушный промежуток и при замедлении в кристаллах. Зависимость энергии КЛ от энергии тормозного излучения приведена на рис. 2.

Проведено сопоставление кинетики КЛ с кинетикой РЛ под действием гамма-квантов. Установлено, что времена высвечивания КЛ и РЛ совпадают в пределах ошибки измерений. Проведена аппроксимация зависимости энергии КЛ от энергии падающего пучка формулой $E_{lum} = AE_{beam}^B$. Коэффициент нелинейности для кристалла LFS-3 составляет $B = 1.08 \pm 0.01$, что указывает на нелинейность сцинтилляции, то есть на непропорциональность между энергией КЛ и числом электронно-дырочных пар.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 19-79-30086.

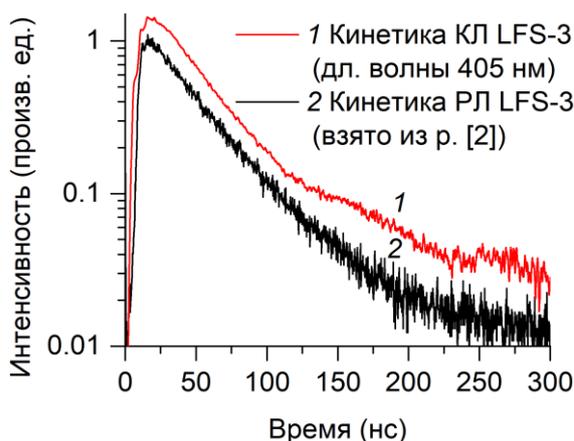


Рис. 1, кинетика КЛ (1) и РЛ (2) LFS-3

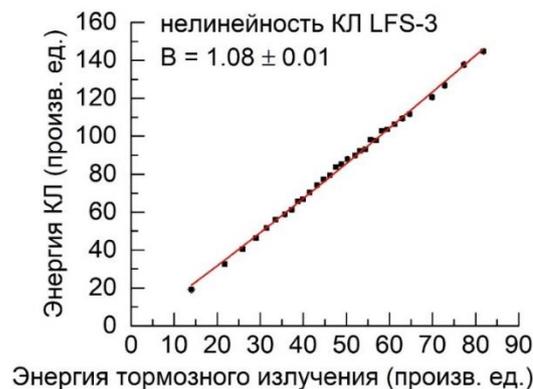


Рис. 2, зависимость $E_{lum}(E_{beam})$ LFS-3

Литература

1. Andrey N. Vasil'ev, «From Luminescence Non-Linearity to Scintillation Non-Proportionality», IEEE TRANSACTIONS ON NUCLEAR SCIENCE, V. 55, N 3, JUNE 2008, P. 1054–1061 Ю.Д. Заварцев и др., LFS-3 – Новый радиационно-стойкий сцинтиллятор для электромагнитных калориметров // Краткие сообщения по физике ФИАН, № 2, С. 13–20 (2013).
2. Завертяев М.В. и др. Излучение молекулярного азота при бомбардировке электронами пиролитического аэрогеля SiO₂ и алюминия // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики, Т. 110, № 10, С. 652–657 (2019).

УДК 535:530.182, 535-14

Угловая направленность различных спектральных компонент терагерцового излучения, генерируемого в плазме одноцветного филамента

Г.Э. Ризаев^{1,2}, Д.В. Мокроусова², Л.В. Селезнев², А.А. Ионин²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Плазма, образующаяся при филаментации ультракоротких лазерных импульсов, является источником терагерцового излучения [1]. При этом терагерцовое излучение, генерируемое в одноцветном филаменте, имеет направленность в виде полого конуса, с минимумом на оси [2]. Однако если филамент поместить в область постоянного электрического поля, диаграмма направленности терагерцового излучения сужается и конус имеет уже максимум на оси [3]. В большинстве работ по измерению угловых направленностей терагерцового излучения использовались либо гетеродинные детекторы, позволяющие получить информацию лишь об одной конкретной частоте, либо широкополосные детекторы, такие как болометры и ячейки Голея. Сравнения распространения разных частот терагерцового излучения отдельно не проводилось. В настоящей работе мы экспериментально исследовали угловое распределение отдельных спектральных терагерцовых компонент, а также изучили изменения частотных диаграмм направленности при постепенном увеличении внешнего электрического поля в области филаментации.

Эксперимент проводился на титан-сапфировой лазерной системе с центральной длиной волны 740 нм, длительностью импульса 90 фс и частотой следования импульсов 10 Гц. Пучок диаметром 3 мм (FWHM) фокусировался линзой с фокусным расстоянием 17 см в 5-миллиметровый зазор между электродами, задний край которых совпадал с фокусом линзы. Терагерцовое излучение регистрировалось болометром, вращающимся вокруг оси, проходящей через фокус линзы (рис. 1а). Для выделения отдельных спектральных компонент перед входным окном болометра помещались узкополосные терагерцовые фильтры, характеристики которых приведены на рис. 1б.

При нулевом напряжении на электродах диаграмма направленности излучения частотой 0.1 ТГц представляла собой полый конус (рис. 2а), при этом с другими фильтрами сигналы зарегистрировать не удалось. Поскольку угловое распределение терагерцового излучения, снятое в тех же условиях без фильтров, имеет сходную форму, можно сделать вывод, что в отсутствие внешнего поля терагерцовое излучение генерируется вблизи частоты 0.1 ТГц. В случае приложения к электродам напряжения 1,5 кВ, что соответствует напряженности поля

3 кВ/см, проявлялись более высокочастотные компоненты терагерцового излучения, распространяющиеся по оси, в то время как форма направленности излучения частотой 0.1 ТГц существенно не изменилась (рис. 2б).

Таким образом, в данной работе показано, что угловые распределения разных частот терагерцового излучения, генерируемого в филаментационной плазме, различаются, а также приложение внешнего электрического поля приводит к проявлению более высоких терагерцовых компонент, имеющих максимум на оси, в результате чего и происходит трансформация суммарной диаграммы направленности от полого конуса к заполненному.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-02-00114.

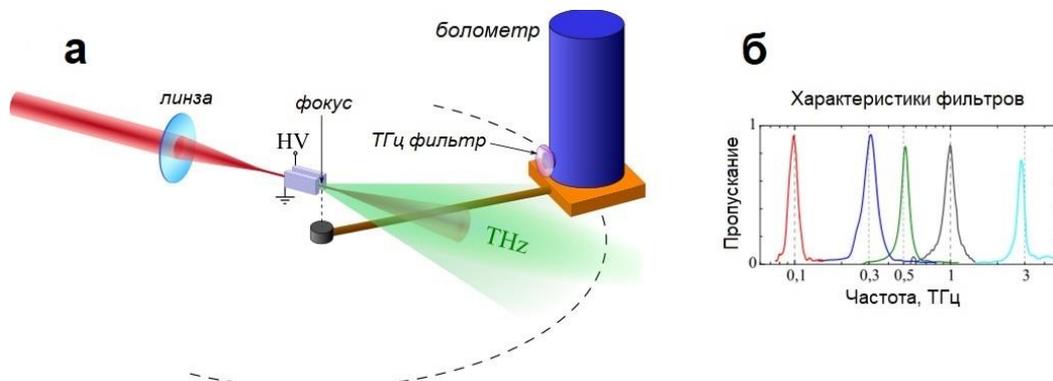


Рис. 1. Схема эксперимента по регистрации угловых направленностей терагерцового излучения (а) и характеристики терагерцовых фильтров (б)

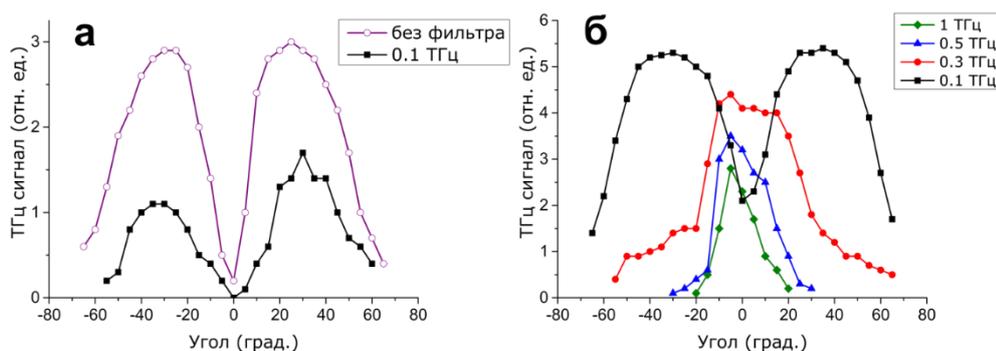


Рис. 2. Угловые распределения различных спектральных компонент терагерцового излучения, генерируемого в плазме одноцветного филамента в отсутствие внешнего электрического поля (а) и во внешнем электростатическом поле напряженностью 3 кВ/см (б)

Литература

1. Tzortzakis S, Méchain G., Patalano G., André Y.-B., Prade B., Franco M., Mysyrowicz A., Munier J.-M., Gheudin M., Beaudin G., and Encrenaz P. Coherent subterahertz radiation from femtosecond infrared filaments in air // Opt. Lett. 2002. V. 27. N 21. P. 1944.
2. D'Amico C., Houard A., Franco M., Prade B., Mysyrowicz A., Couairon A., Tikhonchuk V. T., Conical Forward THz Emission from Femtosecond-Laser-Beam Filamentation in Air // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 98. P. 235002.
3. Houard A., Liu Y., Prade B., Tikhonchuk V., and Mysyrowicz A. Strong Enhancement of Terahertz Radiation from Laser Filaments in Air by a Static Electric Field // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 100. P. 255006.

УДК 535.015

Модель для описания нелинейно-оптического отклика J-агрегата PIC на лазерные импульсы разной продолжительности

С.С. Моритака^{1,2}, А.Д. Кондорский², В.С. Лебедев²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

J-агрегат псевдоизоцианина (PIC) является материалом с рекордными значениями оптической нелинейности. Он интересен как диэлектрик в составе гибридных металлоорганических наночастиц, поскольку эффекты

экситон-плазмонного взаимодействия приводят к нетривиальным изменениям в спектрах поглощения по сравнению со спектрами непокрытых металлических частиц. Распространенным методом теоретического анализа таких частиц является метод FDTD. В рамках этого метода дисперсия восприимчивости материалов моделируется как определённая временная функция отклика материала на приложенное электрическое поле. Для задач линейной оптики часто хватает суперпозиции простых функций отклика, например, затухающих осцилляторов. Для задач нелинейной оптики функции отклика становятся существенно более сложными, причём даже для простейшего случая мгновенной нелинейности. Поэтому нами был разработан подход, при котором материал с дисперсией нелинейной восприимчивости моделируется как многоуровневая квантовая система с оптическими дипольными переходами в приближении грубой сетки.

Мы рассмотрели эксперимент по измерению нелинейного резонансного поглощения плёнки J-агрегата PIC [1]. В указанной работе спектр был получен для импульсов накачки большой длительности, порядка 5 нс. При этом известно, что спектры переходного поглощения PIC при возбуждении короткими импульсами существенно зависят от задержки между импульсом накачки и зондовым импульсом. Поэтому недостаточно, чтобы модель соответствовала только вышеназванному нелинейному спектру. Была поставлена задача предложить модель для качественно верного описания нелинейного отклика наноструктур на лазерные импульсы разной продолжительности.

Для этого были проанализированы результаты экспериментов по переходному поглощению [2]. Импульсы накачки были короткими, порядка 5 фс, кинетика отслеживалась при пико- и субпикосекундных интервалах задержки. В совокупности выявлены три особенности в окрестности J-полосы, которые наиболее значимы для нелинейных спектров. На рис. 1 изображена схема уровней модельной системы, которая успешно описывает эти три особенности.

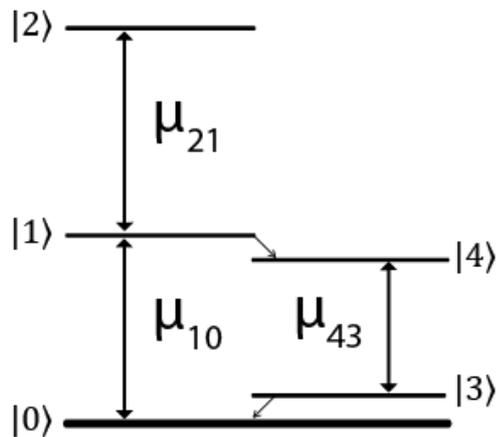


Рис. 1. Схема уровней модельной системы

Осветление основного состояния GSB связано с потерей населённости основным состоянием $|0\rangle$. Особенность находится в максимуме J-полосы и поэтому относится к переходу из состояния $|0\rangle$ в нижнее одноэкситонное состояние $|1\rangle$. В модели линейного агрегата большая часть совокупной силы осциллятора J-полосы сосредоточена именно в этом переходе [3]. Поэтому соседние переходы слабо влияют на оптическую нелинейность и не принимаются во внимание. GSB проявляется при всех временах задержки.

Индукцированное поглощение SA1 обозначает наличие дополнительного перехода, не связанного с основным состоянием. Особенность сдвинута в синюю область относительно основного перехода. В спектре переходного поглощения особенность наиболее выражена при короткой задержке, ослабевает при длительной задержке. В ослабленном виде присутствует в спектре нелинейного поглощения. Исходя из этого, заселение нижнего состояния этого перехода осуществляется импульсом накачки. Поскольку населённость основного состояния под действием накачки переходит на состояние $|1\rangle$, то именно оно является нижним для данного перехода. В таком случае верхнее состояние идентифицируется как нижнее состояние двухэкситонной полосы $|2\rangle$, что соответствует литературе [4].

Индукцированное поглощение SA2 обозначает наличие ещё одного перехода, не связанного с основным состоянием. Особенность сдвинута в красную область относительно основного перехода. В спектре переходного поглощения не проявляется, но наблюдается в спектре нелинейного поглощения. Тот факт, что особенность не проявляется на коротких временах, говорит о том, что заселение соответствующих состояний происходит в результате некоторой релаксации. Усилению SA2 сопутствует ослабление SA1, что позволяет предположить, что состояния рассматриваемого перехода заселяются в результате релаксации состояния $|1\rangle$. Поскольку с красной стороны от J-полосы PIC нет полос линейного поглощения, то нижнее состояние этого перехода не является основным. Поскольку усиление SA2 не пропорционально ослаблению SA1, релаксация состояния $|1\rangle$ происходит в верхнее состояние $|4\rangle$, а не нижнее состояние $|3\rangle$ данного перехода. Подобные состояния наблюдались в исследованиях люминесценции PIC [5].

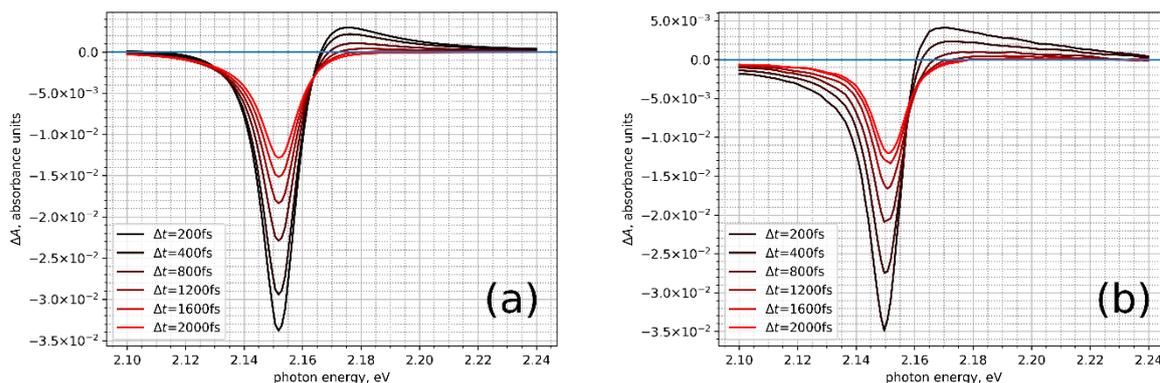


Рис. 2. сравнение спектров переходного поглощения, полученных в результате моделирования (а) и эксперимента (б)

Программа для реализации метода FDTD была написана на языке Python с использованием библиотеки с открытым исходным кодом MEEP. Заметим, что плёнки в разных экспериментах отличались по толщине и концентрации агрегатов. Поэтому концентрация агрегатов была подобрана из соответствия спектров линейного поглощения. Интенсивности источников также были подобраны в результате моделирования процедуры калибровки.

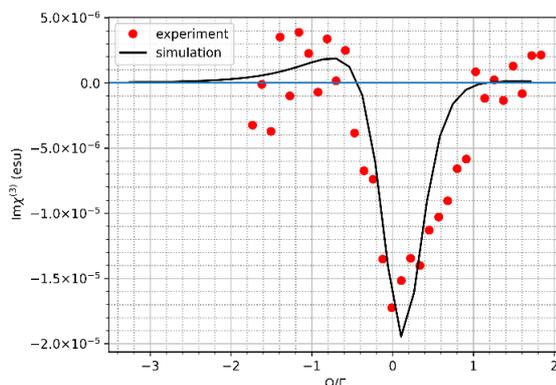


Рис. 3. сравнение спектров нелинейной восприимчивости. Ω – отстройка от J-полосы, Γ – ширина J-полосы

На рис. 2 приведено сравнение спектров переходного поглощения плёнки J-агрегата, полученных в результате моделирования с использованием нашей модели, с результатами эксперимента [2]. В качестве импульса накачки выступала система гауссовых импульсов, подобранных для соответствия спектру источника в эксперименте.

На рис. 3 приведено сравнение спектра нелинейного поглощения, полученных с использованием той же модели, и результатов эксперимента [1]. В качестве источника накачки использовался квазимонохроматический источник, перестраиваемый для исследования каждой отдельной длины волны.

Тем самым показано, что предложенная квантовая система из пяти уровней позволяет описать нелинейно-оптический отклик PIC. Она работает для лазерных импульсов длительностью от сотен фемтосекунд до наносекунд.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-79-30086).

Литература

1. *Markov R.V. et al.* Nonlinear optical properties of two types of PIC J-aggregates in thin films // Optical Information Science and Technology (OIST97): Optical Recording Mechanisms and Media // International Society for Optics and Photonics, 1998. Т. 3347. С. 176–183.
2. *Kobayashi T., Du J., Kida Y.* Ultrafast Real-time Vibrational Dynamics // J-Aggregates // J-Aggregates: V. 2. 2012. С. 1–47.
3. *De Boer S., Vink K.J., Wiersma D.A.* Optical dynamics of condensed molecular aggregates: an accumulated photon-echo and hole-burning study of the J-aggregate // Chemical physics letters. 1987. Т. 137. № 2. С. 99–106.
4. *Fidder H., Knoester J., Wiersma D.A.* Observation of the one-exciton to two-exciton transition in a J aggregate // The Journal of chemical physics. 1993. Т. 98. № 8. С. 6564–6566.
5. *Sorokin A.V. et al.* Evidence of exciton self-trapping in pseudoisocyanine J-aggregates formed in layered polymer films // The Journal of Physical Chemistry C. 2015. Т. 119. № 49. С. 27865–27873.

Оптимизация линейной оптики коллайдера ВЭПП-4М

Р. З. Мамутов

Новосибирский государственный университет
Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН

В данной работе реализованы методы коррекции и оптимизации линейной структуры коллайдера ВЭПП-4М [1]. Представлены необходимые процедуры и этапы восстановления проектной структуры коллайдера. Описана компьютерная программа, реализующая необходимые алгоритмы и этапы коррекции, а также позволяющая автоматизировать все процедуры.

Структура коллайдера состоит из 26 квадрупольных линз, 108 магнитов со совмещенными функциями, 22 корректирующих орбиту магнита (корректора) и 54 датчика положения пучка (ДПП).

Основной метод, реализованный в данной работе, называется LOCO (Linear Optics from Closed Orbits) [2]. Данный метод находит неидеальности в магнитной структуре и расхождения между реальными параметрами и проектными (модельными). LOCO основывается на измерении матрицы откликов орбиты: регистрируется изменение орбиты пучка во всех ДПП за счет поочередного изменения поля в каждом из корректоров. Таким образом, составляется полная матрица. Линейное уравнение, описывающее процесс, представлено ниже:

$$R_{ij} = \frac{dx_i}{d\theta_j}, \quad (1)$$

здесь dx_i – отклик орбиты в ДПП с номером i по выбранной степени свободы и $d\theta_j$ – изменение поля j корректора, выраженное в угловых величинах.

Идея корректирующей (оптимизирующей) процедуры есть минимизация хи-квадрата или расхождений между экспериментальной и проектной матрицами за счет варьирования некоторого набора параметров \mathbf{p} модели [3]:

$$\chi^2 = \sum_{ij} \frac{1}{\sigma_j^2} (R_{ij}^{\text{exp}} - R_{ij}^{\text{model}})^2 = \mathbf{r}^T \mathbf{r} = f(\mathbf{p}) \quad (2)$$

где σ_i – точность показания i ДПП. Как только достигнута желаемая точность, все изменения, внесенные в модельную структуру, берутся с обратным знаком и вносятся уже в реальную структуру.

В данной работе в качестве оптимизационных алгоритмов были рассмотрены алгоритмы Гаусса–Ньютона и Левенберга–Марквардта, как описано в работе [3]. Учитывая, что полученные в результате работы алгоритмов матрицы не являются квадратными, то для их обращения используется SVD обращение. Решение, минимизирующее хи-квадрат и получающееся при использовании алгоритма Гаусса–Ньютона, представлено ниже:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + J \Delta \mathbf{p}, \quad c J_{ij} = \frac{\partial r_i}{\partial p_j}, \quad (3)$$

$$f(\mathbf{p}) \approx f(\mathbf{p}_0) + 2\mathbf{r}_0 J \Delta \mathbf{p} + \Delta \mathbf{p}^T J^T J \Delta \mathbf{p}, \quad (4)$$

$$\Delta \mathbf{p} = -(J^T J)_{\text{svd}}^{-1} J^T \mathbf{r}_0, \quad (5)$$

На ряду с традиционным методом, описанным выше, были рассмотрены методы машинного обучения (МО), такие как Linear Regression, Random Forest, Ridge Regression и Orthogonal Matching Pursuit (OMP) [4]. Многоцелевая регрессия применима в данной задаче: в качестве выходных параметров выступают ошибки элементов модели ускорителя. Входными данными являются матрицы откликов. Для этого была использована библиотека Python Scikit-learn. Для тренировки моделей были смоделирован набор из 45000 матриц откликов с введенными ошибками с модель ускорителя.

Для проведения коррекции была написана компьютерная программа, целью которой является реализация предложенных алгоритмов и автоматизация процедуры коррекции. Но перед тем, как применять её на реальной установке, следует проверить её на моделях. Потому, в ходе работы, был написан код на Python, позволяющий в первую очередь работать на разных аппаратных платформах и операционных системах. Он также позволяет работать с большими массивами данных быстро и эффективно. Для моделирования структуры ускорителя и динамики пучка в нем был использован специальный модуль MAD-X [5], являющийся крайне полезным инструмен-

том в физике ускорителей. Как правило, все вычисления производятся не дольше 10 минут, поэтому эту программу можно применять в онлайн-режиме, во время работы ускорителя. Кроме того, программа имеет графический интерфейс для простого и удобного её использования оператором комплекса.

Соответственно, чтобы протестировать код и найти неидеальности структуры, в модель искусственно вносятся ошибки: 1% к градиентам нескольких квадруполов. Затем, алгоритм был применен к матрице откликов для модели с ошибками, полученной с помощью MAD-X. Поэтому «реальная» структура здесь используется как модельная с ошибками. Также натренированным моделям МО на вход подавалась эта же матрица.

Результатом процедуры является набор переменных, которые приблизили идеальную матрицу откликов к матрице откликов с ошибками в структуре в пределах точности смоделированных погрешностей показаний ДПП (шум ДПП). Иначе говоря, выходными данными является набор ошибок градиентов элементов. Операции, проделанные выше, привели к достаточно точному выявлению ошибок и восстановлению оптических функций в режиме работы на энергии 1.8 ГэВ. Невязки бета-функций относительно идеальных значений (биения бета-функций) существенно уменьшились (рис. 1), а хи-квадрат уменьшился в $5 \cdot 10^7$ раз за 3 итерации. На рис. 2 представлен пример работы алгоритма Random Forest. Внесенные ошибки были найдены с высокой точностью. Сравнение методов показано в табл. 1. Наилучшие результаты достигнуты с помощью Linear Regression.

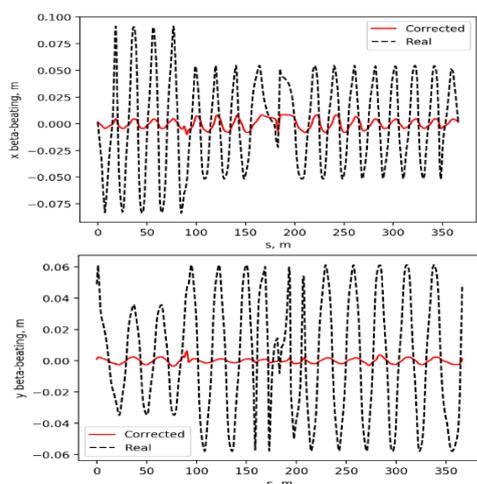


Рис. 1. Горизонтальное (x) и вертикальное (y) биения бетатронной функции по периметру ускорителя

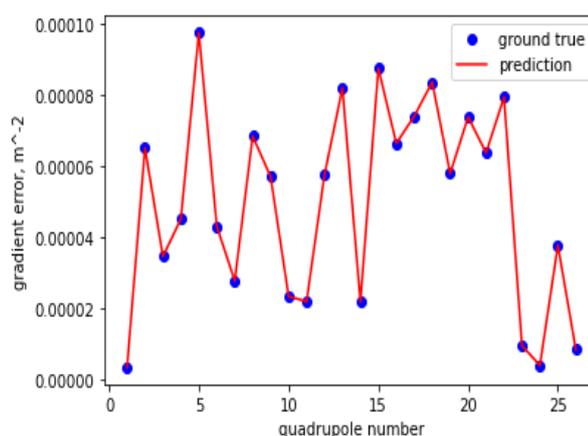


Рис. 2. Предсказания ошибок алгоритма Random Forest для каждого квадруполя

Таблица 1. Средняя абсолютная ошибка для разных алгоритмов для случайно выбранного вектора ошибок

Метод	Средняя абсолютная ошибка, m^{-2}
<u>LOCO</u>	$1.13 \cdot 10^{-7}$
<u>Linear Regression</u>	$7.38 \cdot 10^{-11}$
<u>Random Forest</u>	$5.01 \cdot 10^{-9}$
<u>Ridge Regression</u>	$2.23 \cdot 10^{-6}$
<u>OMP</u>	$8.44 \cdot 10^{-8}$

Литература

1. Zhuravlev A.N., Karnaev S.E., Levichev E.B., Meshkov O.I., Nikitin S.A., Nikolaev I.B., Piminov P. A. (2020). Current Status of the VEPP-4 Accelerator Facility. Physics of Particles and Nuclei Letters. 17. 938–950. 10.1134/S1547477120070067.
2. Safranek J. Experimental determination of storage ring optics using orbit response measurements // Nucl. Instrum. Meth. A388, 27–36 (1997).
3. Huang X., Beam-based Correction and Optimization for Accelerators (CRC Press, Taylor & Francis Group, Boca Raton, FL, 2019). P. 98–105.
4. Fol E., Evaluation of Machine Learning Methods for LHC Optics Measurements and Corrections Software. CERN-THESIS-2017-336. 2017.
5. Grote H., Schmid F. MAD-X a upgrade from MAD8. ConfProc C. (2003) 030512:3497. doi: 10.1109/PAC.2003.1289960.

Двухкомпонентные слоевые нанопроволоки с управляемой агломерацией для SERS-спектроскопии

Е.П. Кожина^{1,2,3}, С.А. Бедин^{1,4}

¹Московский педагогический государственный университет

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

⁴ФНИЦ «Кристаллографии и фотоники» РАН

Прогресс в области нанотехнологий позволяет изготавливать и синтезировать упорядоченные магнитные наноструктуры (НС) с требуемой морфологией, структурой и магнитными свойствами для применения в области биомедицины для таких задач, как биокатализ, биодетектирование, биосепарация, доставка лекарств и генов и т.д. Среди НС с различной морфологией выделяют такие структуры, как наночастицы (НЧ), нанопроволоки (НП) и нанотрубки (НТ). Одним из наиболее надежных методов, позволяющим контролируемо получать металлические одномерные НС с заданными размерами, параметрами и свойствами, является метод электроосаждения в поры шаблонов, таких как ионно-трековые мембраны (ТМ) или пористый оксид алюминия [1]. Использование в качестве шаблонов ТМ наиболее перспективно ввиду невысокой плотности пор, что играет важную роль для оптических характеристик получаемых наноструктур.

Основными проблемами создания интегрированных наноструктур или наноструктурированных подложек для спектроскопии, основанной на плазмонном резонансе, является их малое время жизни и усиление интенсивности сигнала исследуемых соединений в узком диапазоне длин волн. Таким образом, поиск новых платформ для методов спектроскопии, основанной на плазмонном резонансе, является актуальной задачей.

В работе предлагается новая методика получения одномерных многокомпонентных наноструктур на примере НП с использованием электрохимического осаждения в порах трековых мембран. Изменяя параметры синтеза (композиции электролита, прикладываемого потенциал, время осаждения и т.д.) и шаблона (размеров пор, пористости), можно управлять элементным составом, структурой, оптическими и магнитными свойствами одномерных НП и их массивов [2–4]. Новизна заключается в имплементации уже известных методик шаблонного синтеза для создания магнитно-оптических массивов наноструктур с использованием плазмонных металлов, которые можно использовать для усиления сигнала в методах спектроскопии, основанных на плазмонном резонансе. В нашем случае, основой получаемых массивов является магнитный металл (Ni), а в качестве модифицирующего выступает плазмонный металл – серебро.

Для снятия SERS-спектров в качестве исследуемого вещества был выбран родамин 6G. Это органический краситель с хорошо изученным спектром, что позволяет объективно сравнивать полученные результаты с другими исследовательскими группами. Ранее мы показали [5], что при выращивании на металлической подложке большого числа свободностоящих нанопроволок они склонны к агломерации за счёт капиллярных сил. Поскольку подложки со слоевыми нанопроволоками Ag-Ni-Ag имеют магнитную компоненту, то помощи внешнего магнитного поля можно дополнительно управлять агломерацией таких ансамблей. Таким образом, подключение внешнего магнитного поля во время измерений SERS спектров способствует созданию интенсивного локального электрического поля для молекул, которые расположены между вершинами соседних нанопроволок (рис. 1), что дополнительно приводит к повышению интенсивности SERS сигнала.

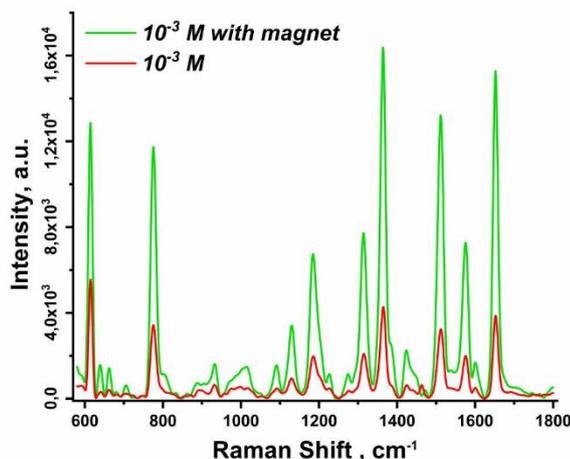


Рис. 1. SERS-спектры R6G, адсорбированного на подложке со слоевыми нанопроволоками Ag-Ni-Ag, с приложением магнитного поля и без него

Литература

1. *Kaniukov E.Y., Shumskaya E.E., Kutuzau M.D., Borgekov D.B., Kenzhina I.E., Kozlovskiy A.L., Zdorovets M.V.* Ferromagnetic Nanotubes in Pores of Track Membranes for the Flexible Electronic Elements // *Devices and Methods of Measurements*. 2017. V. 8, N 3. P. 214–221.
2. *Vivas L.G., Ivanov Y.P., Trabada D.G., Proenca M.P., Chubykalo-Fesenko O., Vazquez M.* Magnetic properties of Co nanopillar arrays prepared from alumina templates // *Nanotechnology*. 2013. V. 24, N 10. P. 105703.
3. *Martin C.R.* Nanomaterials: a membrane-based synthetic approach // *Science*. 1994. V. 266, N 5193. P. 1961–6.
4. *Haehnel V., Fähler S., Schaaf P., Miglierini M., Mickel C., Schultz L., Schlörb H.* Towards smooth and pure iron nanowires grown by electrodeposition in self-organized alumina membranes // *Acta Materialia*. 2010. V. 58, N 7. P. 2330–2337.
5. *Kozhina E.P., Bedin S.A., Nechaeva N.L., Podoyntsyn S.N., Tarakanov V. P., Andreev S.N., Grigoriev Y.V., Naumov A.V.* Ag-Nanowire Bundles with Gap Hot Spots Synthesized in Track-Etched Membranes as Effective SERS-Substrates // *Applied Sciences*. 2021. V. 11, N 4. P. 1375.

Секция сверхпроводимости, низких температур и квантовых материалов

УДК 538.945

Определение сверхпроводящих параметров порядка слабо передопированных пниктидов $\text{BaFe}_{1.88}\text{Ni}_{0.12}\text{As}_2$ методом SnS-андреевской спектроскопии

В.М. Михайлов^{1,2}, С.А. Кузьмичев^{3,1}, К.С. Перваков¹, В.А. Власенко¹, Т.Е. Кузьмичева¹

¹Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В.Л. Гинзбурга, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Физический факультет Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова

Исследования проводились на монокристаллах слабо передопированного состава $\text{BaFe}_{1.88}\text{Ni}_{0.12}\text{As}_2$, являющихся слоистыми высокотемпературными сверхпроводниками. Кристаллическая структура образцов состоит из чередующихся FeAs блоков и плоскостей бария, выполняющих роль нормального металла. Внутри FeAs блоков атомы железа располагаются в параллельных плоскостях, ответственных за сверхпроводимость образца. В стехиометрическом составе BaFe_2As_2 не обладает сверхпроводимостью ни при каких температурах, вместо этого в плоскостях железа наблюдается состояние с волной спиновой плотности (SDW), которое мешает сверхпроводимости. При электронном допировании SDW-состояние подавляется и образец становится сверхпроводником ниже критической температуры T_c . При оптимальном допировании, критическая температура $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ достигает 20 К, для наших образцов $T_c \approx 18\text{--}19$ К. Кристалл был синтезирован с применением методики «self flux» [1].

Сверхпроводящий параметр порядка был определён на основании анализа спектров дифференциальной проводимости SnS-контактов. SnS-контакты, состоящие из сверхпроводящих берегов исследуемого образца и тонкого металлического слоя между ними, были образованы с помощью техники «break-junction» [2]. Для железосодержащих пниктидов характерно образование андреевских контактов, в которых наблюдается эффект многократных андреевских отражений. На спектре SnS-контакта эффект вызывает субгармоническую структуру (СГС), состоящую из минимумов, положения которых определяются только щелевым параметром сверхпроводника. Для n-щелевого сверхпроводника, вследствие линейности системы, на спектре будут видны n таких структур.

Оценка показала, что для SnS-контактов, полученных в исследуемых образцах, отношение длины неупругого рассеяния к размеру контакта $l/d \ll 1$, таким образом, ожидается появление одной гармоники от каждой сверхпроводящей щели на смещении $eV = 2\Delta$. Нами при $T \ll T_c$ были обнаружены три минимума, из положений которых было напрямую определено три сверхпроводящих параметра порядка: малая щель $\Delta_s \approx 1.4$ мэВ и дублет, соответствующий большой щели с пороговыми амплитудами $\Delta_L^{\text{in}} \approx 3.3$ мэВ, $\Delta_L^{\text{out}} \approx 4.5$ мэВ. Полученные результаты оказались довольно близки к значениям, полученным с помощью оптических измерений [3] и методики «break-junction» [4] для оптимально допированного состава $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$.

Характеристические соотношения, соответствующие большой щели, превосходят БКШ предел в 3.5, а отношение для малой щели оказывается меньше 3.5, что характерно для многощелевых сверхпроводников и говорит о взаимодействии двух сверхпроводящих конденсатов. Измеренные температурные зависимости щелей $\Delta_L^{\text{in}}(T)$ и $\Delta_L^{\text{out}}(T)$ сходны между собой, но отличаются от таковой зависимости для малой щели $\Delta_s(T)$. Сравнение экспериментальных температурных зависимостей с БКШ-образной зависимостью указывает на невозможность описания полученных данных с помощью однозонной теории БКШ.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «Физика высокотемпературных сверхпроводников и новых квантовых материалов», № 0023-2019-0005).

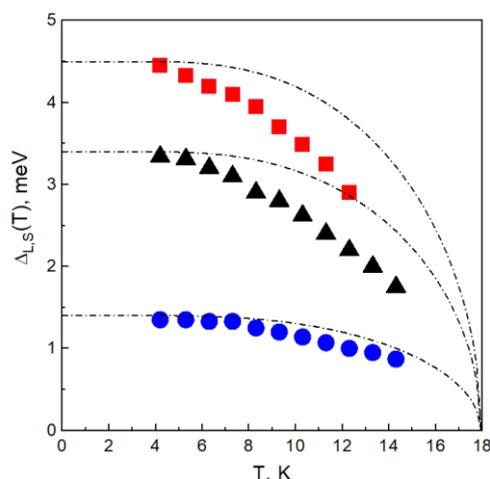


Рис. 1. Зависимости щелевых параметров $\text{BaFe}_{1.88}\text{Ni}_{0.12}\text{As}_2$ от температуры, пунктирными линиями отмечены соответствующие БКШ-кривые

Литература

1. *Pervakov et al.* Bulk magnetization and strong intrinsic pinning in Ni-doped BaFe_2As_2 single crystals // *Supercond. Sci. Technol.* 2013. V. 26. P. 015008.
2. *Кузьмичева Т.Е., Кузьмичев С.А.* Техника «break-junction» применительно к слоистым сверхпроводникам // *Физ. Низк. Темп.* 2016 Т. 42. С. 1284.
3. *Aleshchenko et al.* Optical and hidden transport properties of $\text{BaFe}_{1.91}\text{Ni}_{0.09}\text{As}_2$ film // *J. Phys.: Condens. Matter* 2021 V. 33. P. 045601.
4. *Кузьмичева Т.Е., Кузьмичев С.А.* Спектроскопия многократных андреевских отражений сверхпроводящих пниктидов $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$ оптимального состава // *Письма в ЖЭТФ* 2020 Т. 112. С. 822.

УДК 538.935

Линейное магнетосопротивление и транспортные параметры поликристаллов $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$

Ф.С. Зуй¹, Л.Н. Овешников², А.И. Риль³, Б.А. Аронзон²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

³Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН

За последние полтора десятилетия топологические материалы стали одним из ключевых направлений исследований в физике конденсированного состояния. Объемный электронный спектр дираковских (ДПМ) и вейлевских (ВПМ) полуметаллов характеризуются наличием киральных состояний с трехмерным линейным законом дисперсии в окрестности изолированных точек зоны Бриллюэна, в которых проводящая и валентная зоны касаются друг друга. При этом спектр ДПМ является кирально-вырожденным, а нарушение симметрии к обращению времени или инверсии снимает вырождение и переводит систему в состояние ВПМ. В обоих случаях киральный бесщелевой спектр носителей заряда приводит к возникновению нетривиальной фазы их волновой функции (фазы Берри), детектирование которой свидетельствует о топологической природе исследуемого материала. Подобные эксперименты [1], вкуче со спектроскопическими исследованиями [2], подтвердили наличие фазы ДПМ в Cd_3As_2 . Учитывая высокую стабильность данного материала к внешним условиям, арсенид кадмия представляется удобной платформой для исследования переходов между различными топологическими фазами, например, при магнитном допировании, которое, в частности, нарушает симметрию системы к обращению времени. В свою очередь, магнитные топологические материалы представляют интерес для спинтронных приложений.

В данной работе проводилось уточнение микроструктурных параметров и исследование низкотемпературного магнетотранспорта в поликристаллах $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ с $x = 0-0.08$. Образцы были синтезированы прямым сплавлением высокочистых элементов. Исходный Cd_3As_2 имеет 4 полиморфных модификации, лишь одна из которых (α -фаза) устойчива при комнатной температуре. Предваритель-

ные рентгеноструктурные исследования показали, что допирование кристаллов марганцем способствует стабилизации фазы α'' , а композиционно-зависимое изменение параметров решетки подтверждает замещение атомов кадмия, атомами марганца [3]. На основе полученных дифрактограмм, с помощью формулы Шеррера, был оценен средний размер кристаллитов в исследуемых поликристаллах. Полученные результаты свидетельствуют о том, что переход между фазами α и α'' при увеличении содержания Mn происходит без существенного уменьшения интегральных размеров кристаллитов. При этом характерные значения оказываются порядка 100 нм. Такие кристаллиты содержат порядка 10^5 элементарных ячеек, что предполагает отсутствие влияния размерных эффектов на электронный спектр исследуемых образцов.

Зависимость сопротивления образцов $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ от температуры имеет выраженный металлический ход. Увеличение содержания марганца приводит к уменьшению относительной амплитуды падения сопротивления при охлаждении от 300 К до 4.2 К. Полевые зависимости холловского сопротивления имеют ярко выраженный линейный характер, свидетельствующий об отсутствии вклада аномального эффекта Холла, что согласуется с антиферромагнитным характером взаимодействия между атомами марганца в матрице Cd_3As_2 [4]. Увеличение доли марганца приводит к повышению плотности делокализованных носителей заряда. Так как атомы Cd и Mn являются изовалентными, существует 2 возможные причины такого поведения. С одной стороны, допирование марганцем может увеличивать число собственных дефектов кристалла. С другой стороны, часть атомов марганца может занимать позиции в междоузлиях кристаллической решетки и выступать в качестве двойных доноров. Максимальная концентрация таких междоузельных атомов Mn, в рамках базовой оценки, составляет примерно 0.43% от их общего числа. Несмотря на то, что лишь малая часть атомов Mn может занимать междоузельные позиции, это приводит к существенному росту концентрации носителей заряда и исследуемые допированные поликристаллы характеризуются высокими значениями энергии Ферми относительно чистого Cd_3As_2 . При этом, ввиду крайне малой доли междоузельных атомов в кристалле, их наличие не должно существенно менять зонную структуру системы. Таким образом, посчитанная ранее зонная структура идеального $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ [5] должна быть применима для поликристаллов, исследуемых в настоящей работе. Добавление марганца также приводит к заметному уменьшению электронных подвижностей, что связывается с ростом беспорядка в системе. При этом характерные длины свободного пробега электронов в рассматриваемой серии образцов существенно превышают оцененные размеры кристаллитов. Поэтому влияние межзеренных границ в данных системах на электронный транспорт полагается несущественным.

Все исследованные образцы демонстрируют выраженный линейный характер магнетосопротивления. Данный эффект часто наблюдается в кристаллах Cd_3As_2 и имеет колоссальные амплитуды, что частично связывается с разрушением топологической защиты носителей заряда от рассеяния назад под воздействием магнитного поля [6]. При этом наблюдаемое нами уменьшение амплитуды линейного магнетосопротивления с ростом концентрации марганца может объясняться увеличением уровня беспорядка и электронной плотности в рамках свойств исходного Cd_3As_2 . Таким образом, полученные результаты указывают на то, что легирование марганцем не приводит к значительному изменению энергетического спектра исходного материала при относительно высоких энергиях Ферми, что согласуется с результатами зонных расчетов для системы $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ [5].

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 21-12-00254 (<https://rscf.ru/project/21-12-00254/>).

Литература

1. He L.P., Hong X.C., Dong J.K., Pan J., Zhang Z., Zhang J., Li S.Y. Quantum transport evidence for the three-dimensional Dirac semimetal phase in Cd_3As_2 // *Phys. Rev. Lett.* 2014. V. 113. P. 246402.
2. Neupane M., Xu S.-Y., Sankar R., Alidoust N., Bian G., Liu C., Belopolski I., Chang T.-R., Jeng H.-T., Lin H., Bansil A., Chou F., Hasan M.Z. Observation of a three dimensional topological Dirac semimetal phase in high-mobility Cd_3As_2 // *Nature Communications*. 2014. V. 5. P. 3786.
3. Ril' A.I., Marenkin S.F., Volkov V. V., Oveshnikov L.N., Kozlov V. V. Formation of the α'' -phase and study of the solubility of Mn in Cd_3As_2 // *Journal of Alloys and Compounds*. 2022. V. 892. P. 162082.
4. De Jonge W.J.M., Otto M., Denissen C.J.M., Blom F.A.P., Van Der Steen C., Kopinga K. Spin-glass behavior of $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 1983. V. 31–34. P. 1373.
5. Kulatov E.T., Uspenskii Yu.A., Oveshnikov L.N., Mekhiya A.B., Davydov A.B., Ril' A.I., Marenkin S.F., Aronzon B.A. Electronic, magnetic and magnetotransport properties of Mn-doped Dirac semimetal Cd_3As_2 // *Acta Materialia*. 2021. V. 219. P. 117249.
6. Liang T., Gibson Q., Ali M.N., Liu M., Cava R.J., Ong N.P. Ultrahigh mobility and giant magnetoresistance in the Dirac semimetal Cd_3As_2 // *Nature Materials*. 2015. V. 14. P. 280.

Исследование эффекта Холла в планарных микроструктурах из топологического изолятора $\text{Bi}_{1.08}\text{Sb}_{0.9}\text{Sn}_{0.02}\text{Te}_2\text{S}$

А.Э. Борисов, Л.А. Морзун

ЦВСКМ им. Гинзбурга ФИАН им. Лебедева

Топологический изолятор (ТИ) – это изолятор с запрещённой зоной в спектре электронов внутри объема образца («объёмных» электронов), но с бесщелевыми проводящими состояниями на поверхности, которые образуются благодаря топологически нетривиальной природе зонной структуры. Таким образом, в ТИ в процессе переноса электрического заряда участвуют два независимых типа частиц: «объёмные» и поверхностные. Изучение последних ввиду их необычных свойств представляет определённый интерес, однако затруднено принципиальной невозможностью полностью нивелировать влияние «объёмных» носителей. Первым шагом стало открытие материала BSTS, который считается наиболее подходящим для исследований ТИ [1].

В данной работе исследовался магнетотранспорт в планарных образцы из допированного Sn и V соединения BSTS. Мы наблюдали смену характера температурной зависимости сопротивления с полупроводникового на металлический с понижением температуры (рис. 1), а также эффект слабой антилокализации у поверхностных состояний в нормальном поперечном поле образцы магнитном поле.

Особый интерес представляют наблюдаемые особенности эффекта Холла: смена знака поперечного сопротивления при изменении температуры (в ненулевом магнитном поле) и немонотонность зависимости поперечного сопротивления от магнитного поля (рис. 2). Для описания этих наблюдений была применена модель с двумя типами носителей (МДТ) [2]. С её помощью возможно, используя полевые зависимости продольного и поперечного сопротивлений, оценить такие характеристики носителей заряда, как их знак, подвижность и концентрацию.

Математическое описание МДТ даёт простые формулы для зависимости тензора сопротивлений от магнитного поля:

$$\rho_{xx}(B) = \rho_0 [1 + \alpha_{xx} \zeta(\mu_0 B)], \quad (1)$$

$$\rho_{xy}(B) = R_{H_0} [1 - \alpha_{xy} \zeta(\mu_0 B)] B, \quad (2)$$

где $\rho_0, \alpha_{xx}, \alpha_{xy}, R_{H_0}$ – сложные функции концентраций и подвижностей ($\mu_{1,2}$ и $\mu_{1,2}$) соответственно, которые тем не менее позволяют однозначно восстановить их значения. $\zeta(x) = x / (1 + x^2)$. Важно отметить, что формулы (1) и (2) достаточно точно описывают вид экспериментальных зависимостей.

На рис. 3 изображены графики зависимостей вычисленных значений концентраций и подвижностей от температуры. Обратим внимание на некоторые особенности полученных зависимостей:

1. Во всём диапазоне температур знак одного типа носителей остаётся отрицательным, в то время как для другого он меняется с плюса на минус при ~ 200 К. Отсюда разумно заключить, что тип постоянного знака – поверхностные электроны, а тип, меняющий знак, – носители объёма. Результаты также находятся в соответствии с множеством опубликованных данных, указывающих на преобладание дырок в BSTS при околокомнатных температурах.

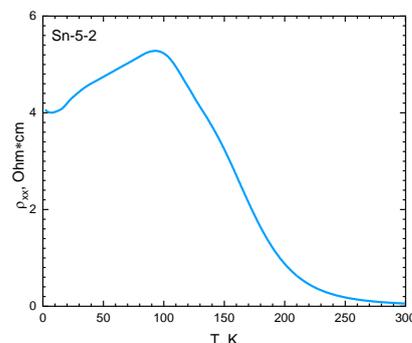


Рис. 1. Температурная зависимость сопротивления

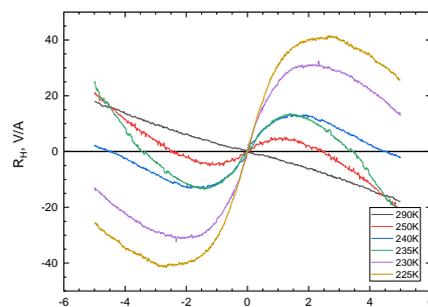


Рис. 2. Полевая зависимость сопротивления Холла

2. При понижении температуры подвижности электронов поверхности и объёма увеличивается, причём для поверхностных носителей она примерно на порядок выше, чем для «объёмных». Также если у поверхности подвижность зависит от температуры приблизительно линейно (выходя на константу при температурах ниже 30 К), то в объёме она после смены знака достаточно быстро выходит на постоянное значение, испытывая резкий скачок при ~ 30 К. Скачок, возможно, связан с проявлением эффекта слабой антилокализации, которая вносит свой вклад в проводимость и не учитывается используемой моделью. То есть эффект приводит к появлению вычислительной ошибки, хотя качественно на поведение не влияет.

3. Поведение концентрации, как видно на графике, оказывается довольно сложным в особенности в окрестности 200 К. Смена знака основных носителей в объёме означает, что на самом деле в системе присутствуют не два, а три типа носителей, и необходимо использовать другую модель. Однако приходится констатировать, что добавление третьего типа носителей, во-первых, чрезмерно усложняет зависимости, и во-вторых, мы не имеем достаточного количества переменных, чтобы вычислить шесть неизвестных (по две для каждого из трёх типов).

4. При сравнении результатов вычислений подвижностей и концентраций для ТИ с добавлением ванадия и без такового мы можем судить о его влиянии на систему: дополнительное допирование понижает концентрацию электронов поверхности, одновременно повышая их подвижность, так что итоговое влияние на продольную проводимость не столь велико;

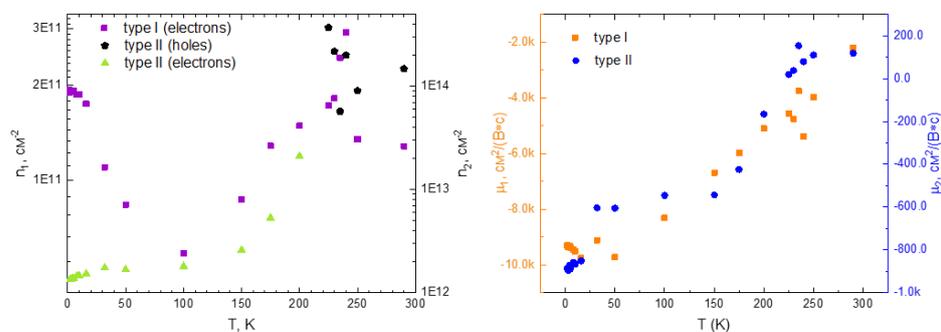


Рис. 3. Зависимости а) концентраций и б) подвижностей носителей от температуры

Итого, при всех недостатках описанного подхода к описанию эффекта Холла он позволяет качественно и даже количественно описать структуру носителей заряда в ТИ. Становится видно явное различие в характеристиках объёмных и поверхностных состояний и их количествах, что даёт основания полагаться на полученные значения хотя бы по порядку величины.

Литература

1. *Kushwaha S.K., Pletikosic I., Liang T.* Sn-doped Bi_{1.1}Sb_{0.9}Te₂S bulk crystal topological insulator with excellent properties // *Nat. Com.* 2016. V. 7.
2. *Endo A., et al.* Two-carrier model on the magnetotransport of epitaxial graphene containing coexisting single-layer and bilayer areas // *Phil. Mag.* 2017. V. 97. P. 1755–1767.

УДК 533.922

Зонная структура топологического изолятора Bi_{1.08}Sn_{0.02}Sb_{0.9}Te₂S, допированного ванадием

К.А. Дмитриева¹, П.И. Безотосный¹, А.Г. Рыбкин², Г.Б. Тейтельбаум³, В.М. Пудалов¹

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

²Санкт-Петербургский государственный университет

³Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского

Соединение Bi_{1.08}Sn_{0.02}Sb_{0.9}Te₂S (BSTS) относится к трехмерным топологическим изоляторам. Методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) исследована электронная зонная структура чистого соединения и допированного ванадием.

Поверхность образцов подготавливалась к измерениям путем скола в условиях сверхвысокого вакуума. Качество поверхности проверялось методом дифракции медленных электронов (LEED). Получена дифракционная картина с четкими рефлексами, которая соответствует ожидаемой для данных образцов. Измерение спектров ARPES проводилось с использованием гелиевой газоразрядной лампы с линиями HeI α и HeII.

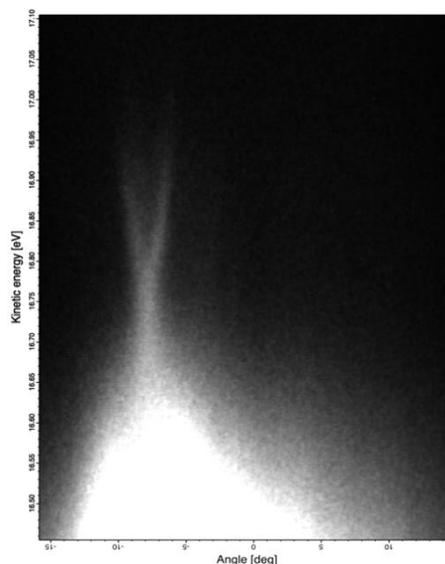


Рис. 1. ARPES-спектр топологического изолятора $\text{Bi}_{1.08}\text{Sn}_{0.02}\text{Sb}_{0.9}\text{Te}_2\text{S}$ с дираковским конусом

Для BSTS, не допированного ванадием, в окрестностях Γ -точки наблюдается дираковский конус (рис. 1), что подтверждает наличие топологических состояний в образцах. В случае допирования исследуемого соединения ванадием происходит изменение зонной структуры. Полученная зонная структура выглядит как наложение двух ARPES-спектров, сдвинутых относительно друг друга по энергии. Это может быть связано с наложением сигналов от разных доменов на поверхности образца. Сдвиг по энергии может быть обусловлен возникновением на поверхности намагниченных участков (так называемых «магнитных капель») [1]. Поскольку магнитные капли распределены неравномерно по поверхности, то они могут по-разному влиять на домены, что и приводит к сдвигу по энергии. Подобное наложение ARPES спектров наблюдалось в других схожих топологических изоляторах [2]. Другой причиной такого изменения зонной структуры может быть влияние фононов на электронные состояния [3]. Для прояснения природы наблюдаемых изменений в зонной структуре необходимы дополнительные исследования данного соединения другими методами.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «Физика высокотемпературных сверхпроводников и новых квантовых материалов», № 0023-2019-0005).

Литература

1. *Sakhin V., Kukovitsky E., Kiiamov A., Khasanov R., Talanov Yu., Teitel'baum G.* To the intrinsic magnetism of the $\text{Bi}_{1.08}\text{Sn}_{0.02}\text{Sb}_{0.9}\text{Te}_2\text{S}$ topological insulator // JETP Letters. 2019. V. 109, N 7. P. 465–471.
2. *Shikin A. M. et al.* Out-of-plane polarization induced in magnetically-doped topological insulator $\text{Bi}_{1.37}\text{V}_{0.03}\text{Sb}_{0.6}\text{Te}_2\text{Se}$ by circularly polarized synchrotron radiation above a Curie temperature // Applied Physics Letters. 2016. V. 109, N 22. P. 222404.
3. *Faeth B. D. et al.* Interfacial Electron-Phonon Coupling Constants Extracted from Intrinsic Replica Bands in Monolayer $\text{FeSe}/\text{SrTiO}_3$ // Physical review letters. 2021. V. 127, N 1. P. 016803.

Исследование свойств многотерминального джозефсоновского контакта

А.Ф. Посадский

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В 1962 г. Б. Джозефсоном [1] был предсказан эффект бездиссипативного протекания тока через слабую связь между двумя сверхпроводниками в отсутствие напряжения. Это явление и до настоящего момента является основой для множества теоретических и экспериментальных исследований. В последнее время большой интерес вызывают джозефсоновские контакты с большим числом ($N > 2$) терминалов, созданные на основе нормальных металлов, полупроводников и сверхпроводников. Описание таких систем с помощью методов теоретической физики необходимо для понимания их ключевых свойств: ВАХ, ток-фазовая характеристика и т.п. Впоследствии эти знания могут помочь интеграции подобных структур в приборы.

Целью данной работы является изучение свойств многотерминального джозефсоновского контакта в случае произвольных длин терминалов (за исключением длин, меньших длины когерентности ξ_0). Мы считаем, что границы между нормальными областями и сверхпроводящими прозрачные, а в центре находится точечная примесь, описываемая некоторой матрицей рассеяния \hat{S} .

С использованием уравнений Боголюбова–Де Жена [2] получены уравнения на коэффициенты при возбуждениях при произвольном числе контактов, рассмотрено уравнение на спектр и его частный случай при равных длинах, получено выражение для вклада в ток от состояний непрерывного спектра.

Для большей наглядности результатов проанализирован частный случай трёх терминалов. С использованием численного моделирования получены спектры такой структуры при различных длинах «колен» (рис. 1.).

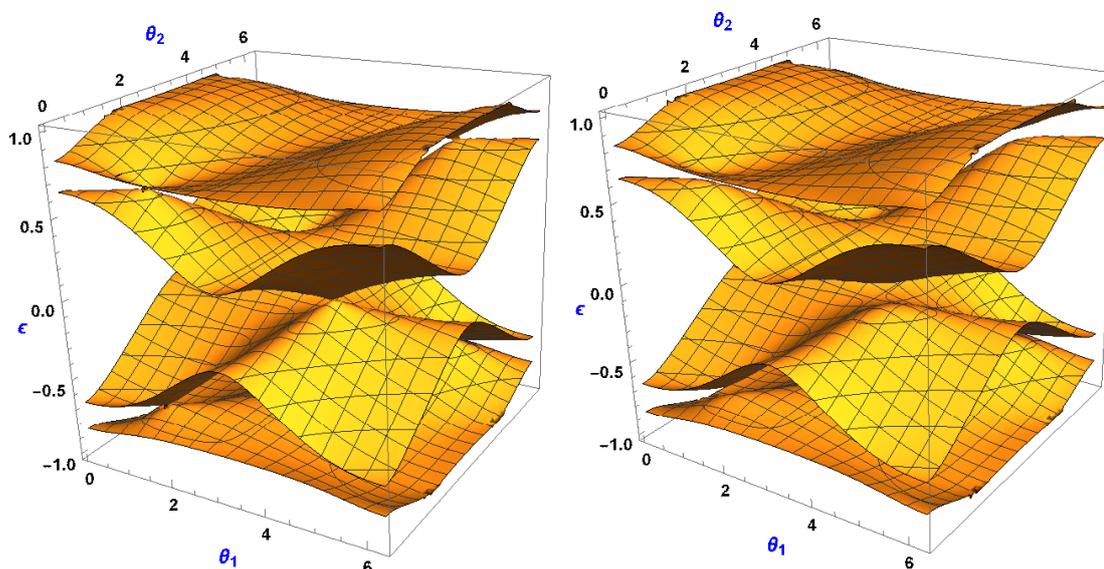


Рис. 1. Графики зависимости энергии от разностей фаз сверхпроводников для чистой (слева) и максимально симметричной (справа) матриц рассеяния

Видно, что реализуются как бесщелевой спектр, так и спектр со щелью. Кроме того, найдено явное выражение для вклада в ток непрерывного спектра. Здесь приведена формула в линейном приближении по коэффициентам прохождения T_{ij} .

$$I_{c,3} = \frac{2e}{h} \left(\int_{-\infty}^{-\Delta_0} + \int_{\Delta_0}^{+\infty} \right) |u^2 - v^2| \left(T_{23} \frac{\sin(\phi_{23})}{\sin(\alpha_{23})} \frac{D(2l_1)(D(l_2 + l_3 - \alpha_{23}) - D(l_2 + l_3 + \alpha_{23}))}{D(l_1 + l_2 + \alpha_{12})D(l_2 + l_3 + \alpha_{23})D(l_3 + l_1 + \alpha_{31})} + T_{31} \frac{\sin(\phi_{31})}{\sin(\alpha_{31})} \frac{D(2l_2)(D(l_3 + l_1 + \alpha_{31}) - D(l_3 + l_1 - \alpha_{31}))}{D(l_1 + l_2 + \alpha_{12})D(l_2 + l_3 + \alpha_{23})D(l_3 + l_1 + \alpha_{31})} \right) f(E) dE, \quad (1)$$

где $D(\psi) = u^4 + v^4 - 2u^2v^2\cos(\psi)$, u , v – факторы когерентности, ϕ_{ij} – разности фаз сверхпроводников, α_{ij} – эффективные разности фаз, l_i – приведённые длины, $f(E)$ – распределение Ферми.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю к.ф.-м.н. Семёнову Андрею Георгиевичу за помощь в координации работы, дельные советы и обсуждения данной задачи, а также всем, кто помогал в процессе написания.

Литература

1. *Josephson B.D.* Possible new effects in superconductive tunnelling // Phys. Lett. 1962. V. 1. P. 251.
2. *П. Де Жен.* Сверхпроводимость металлов и сплавов, Москва, Мир, 1968.
3. *Li-Fu Chang, Bagwell P. F.* Ballistic Josephson-current flow through an asymmetric superconductor – normal-metal – superconductor junction // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. P. 15853.
4. *Bagwell P. F.* Suppression of the Josephson current through a narrow, mesoscopic, semiconductor channel by a single impurity // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P. 12573.
5. *Hong-Yi Xie, Vavilov M.G., Levchenko A.* Topological Andreev bands in three-terminal Josephson junctions // Phys. Rev. B. 2017. V. 96. P. 161406-1.

УДК 53.06

Микромасочная экспресс-фотолитография для работы с чешуйками 2D-материалов

М.В. Пугачев^{1,2}, А.И. Дулебо^{1,2}, А.А. Галиуллин³, А.Ю. Кунцевич²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

³Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Фотолитография является необходимым этапом при изготовлении микроустройств, в частности приборов на основе двумерных материалов или объектов в алмазных камерах высокого давления. Фотолитография позволяет создавать контакты, мезоструктуры, катушек и др. объекты на чипе с разрешением ~ 1 мкм.

Коммерческие установки масочной литографии обычно предназначены для работы с достаточно большими шаблонами диаметром 2–6 дюйма и больше. Это накладывает высокие требования на точность механического совмещения и оптическую систему для равномерной засветки всей площади пластины. При работе с малыми объектами такая степень равномерности избыточна.

В настоящей работе была создана и использована установка масочной литографии, основанная на металлографическом оптическом микроскопе с XYZΘ подвижками (рис. 1). УФ-диод закреплен вместо одной из линз на турели объективов микроскопа. Маска закрепляется на столике микроскопа. Образец крепится под маску на подвижную платформу. Совмещение происходит с помощью микроскопа с использованием линз с большим рабочим отрезком, которые позволяют одновременно наблюдать образец и маску без соприкосновения. После совмещения столик с образцом поднимается до соприкосновения с маской. Далее турель переключается на светодиод и происходит засветка. В данной установке ток через диод и расстояние между диодом и подложкой поддерживаются постоянными. Это означает, что оптимизацию процесса необходимо производить, подбирая время засветки и параметры резиста.

Полученное разрешение и точность совмещения (без системы меток) составили порядка 2 мкм [1]. Область равномерной засветки ~ 1 см². Процедура совмещения и экспонирования занимает несколько минут. Установка имеет компактные размеры, это позволяет ее легко встраивать в перчаточный бокс для избегания контакта образца с воздухом [2].

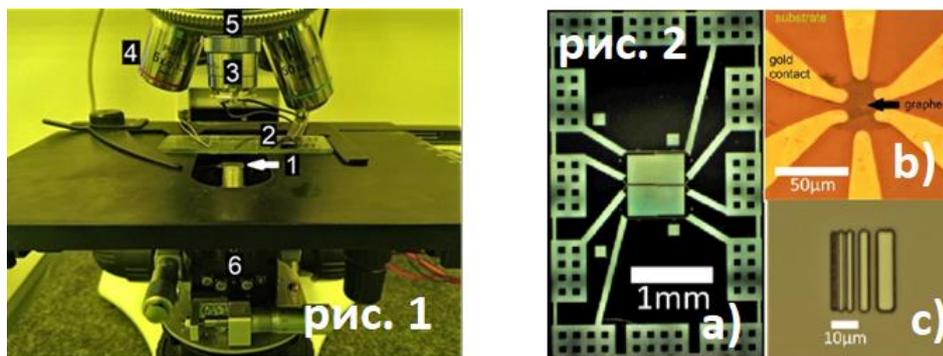


Рис. 1. Фотография установки. 1 – Подложка с образцом, прикрепленная с помощью скотча к XYZ-столику, 2 – стекло с маской, 3 – UV диод, 4 – линза с увеличением $\times 5$, 5 – турель микроскопа, 6 – XYZ-столик

Рис. 2. Примеры изготовленных структур. (а) Структура из Al в форме меандра с контактными площадками, (б) графен в форме мезоструктуры Холл-бар с контактами, (с) Тестовая структура, протравленные в резисте полосы различной толщины

Литература

1. Pugachev M.V., Duleba A.I., Galiullin A.A., Kuntsevich A.Y. Micromask Lithography for Cheap and Fast 2D Materials Microstructures // *Micromachines* 2021. V. 8. P. 850.
2. Gray, M.J.; et al. A cleanroom in a glovebox // *Rev. Sci. Instrum.* 2020. V. 91. P. 073909.

УДК 538.958

Оптическая спектроскопия пленки $\text{BaFe}_{1.91}\text{Ni}_{0.09}\text{As}_2$

А.В. Муратов, Ю.А. Алещенко

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

В работе представлены результаты исследования оптических свойств пленки сверхпроводящего пниктида $\text{BaFe}_{1.91}\text{Ni}_{0.09}\text{As}_2$. Образец был выращен методом импульсного лазерного напыления на подложке CaF_2 . Информация об оптических свойствах в диапазоне $25\text{--}50000\text{ см}^{-1}$ при температурах $5\text{--}300\text{ К}$ была получена совместным использованием эллипсометрии и ФУРЬЕ-спектроскопии.

Анализ экспериментальных результатов в рамках модели Друде–Лоренца показал, что для описания проводимости возможно два различных подхода: два Друде-вклада носителей заряда или комбинация Друде вклада и Лоренциана с сильным затуханием. Вне зависимости от используемого подхода температурное поведение удельного сопротивления пленки и параметров рассеяния показывает квадратичные зависимости при низких температурах, что является следствием Ферми-жидкостного поведения носителей заряда.

При переходе в сверхпроводящее состояние формируется два сверхпроводящих конденсата с различными величинами сверхпроводящих щелей $2\Delta_1=3\text{--}3.4\text{ мЭВ}$ ($2\Delta_1/k_B T_c = 1.8\text{--}2.0$) и $2\Delta_2= 6.4\text{--}7.4\text{ мЭВ}$ ($2\Delta_2/k_B T_c = 3.8\text{--}4.3$).

Результаты исследования подробно представлены в статье [1].

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «Физика высокотемпературных сверхпроводников и новых квантовых материалов», № 0023-2019-0005).

Литература

1. Aleshchenko Yu.A. et al. Optical and hidden transport properties of $\text{BaFe}_{1.91}\text{Ni}_{0.09}\text{As}_2$ film, *J. Phys.: Condens. Matter* 2021 V. 33, N 4, 045601.

Сверхпроводимость нанокompозита Bi-Sn/пористое стекло*М.В. Лихолетова, Е.В. Чарная*

Санкт-Петербургский государственный университет

С развитием технологий наблюдается стремление к миниатюризации электронных устройств и расширению их функциональных возможностей. Это приводит к повышению требований к характеристикам припоя, таким как температура плавления, смачиваемость, надежность контактов, дешевизна и т.д. Ранее в качестве припоя широко использовался сплав Pb-Sn, однако обнаруженная у свинца токсичность привела к ограничению использования этого элемента в производстве [1]. В настоящее время активно ведутся поиски альтернативных сплавов, в том числе сверхпроводящих. Особое внимание уделяется сплавам на основе олова [2, 3].

Важной задачей является изучение влияния ограниченной геометрии на свойства сверхпроводящих припоев. Нанокompозитные структуры позволяют исследовать поведение наносверхпроводника, при этом можно контролировать его форму и размер, а также обеспечить защиту от вредного воздействия окружающей среды [4].

В работе исследовался нанокompозит, представляющий собой эвтектический сплав висмута и олова, внедренный в силикатную матрицу с размером пор ~ 15 нм. Статическая (dc) намагниченность образца была измерена с помощью оборудования MPMS 3 производства Quantum Design Inc. в диапазоне температур 1,9–10 К в магнитных полях до 70 кЭ. Температурные зависимости намагниченности были сняты в режиме нагрева образца в магнитном поле после охлаждения в нулевом поле (ZFC) и в последующем режиме охлаждения при приложении поля (FC).

Температуры перехода в сверхпроводящее состояние для различных полей смещения были отложены на фазовой диаграмме в плоскости поле–температура. Температуры, при которых наблюдалось расхождение между кривыми ZFC и FC, были определены как температуры необратимости и также представлены на фазовой диаграмме. В области малых магнитных полей была выявлена положительная кривизна критических линий, которая с увеличением поля переходит в отрицательную кривизну. Положительный изгиб критических линий был объяснен в рамках модели эффекта близости.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 19-07-00028). Измерения проведены в Ресурсном центре «Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и нанoeлектроники» Научного парка СПбГУ.

Литература

1. *Bieler T.R., Lee T.K.* Lead-Free Solder // Reference Module in Materials Science and Materials Engineering. 2017. P. 1.
2. *Aksoy C., Mousavi T., Brittles G., Grovenor C.R.M., Speller S.C.* Lead-Free Solders for Superconducting Applications // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2016. V. 26. P. 1.
3. *Suganuma K., Kim K.-S.* Physicochemical Properties of Sb-Sn-Zn Alloys // J. Mater. Sci.: Mater. Electron. 2006. V. 18. P. 121.
4. *Shevchenko E.V., Charnaya E.V., Lee M.K., Chang L.-J., Likholetova M.V., Lezova I.E., Kumzerov Y.A., Fokin A.V.* Superconductivity in a Ga-Ag nanocomposite with dendritic morphology // Physica C: Superconductivity and Its Applications. 2020. V. 574. P. 1353666.

Визуализация неоднородного проникновения магнитного поля при обрыве экранирующего тока в импульсно намагниченном YBCO кольце*П.А. Бражник, Е.П. Красноперов*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В работе исследуется импульсное намагничивание монодоменных колец из высокотемпературного сверхпроводника (ВТСП) состава $YBa_2Cu_3O_{7-x}$, полученных методом охлаждения расплава (melt grown). Данный метод намагничивания является наиболее энергоэффективным и экономически оправданным [1]. Монодоменные ВТСП способны захватывать поля порядка 1.5 Тл при температуре кипения жидкого азота ($T = 77$ К), обладая плотностью тока до 30 кА/см² [2].

При импульсном намагничивании ВТСП колец при $T = 77$ К наблюдалась своеобразная неустойчивость сверхпроводящего состояния [3]. Возрастающее с высокой скоростью магнитное поле индуцирует сверхпроводящий экранирующий ток. Когда ток в кольце достигает критической величины, то его дальнейший рост становится невозможным. В этот момент происходит резкое падение циркулирующего тока в десятки раз (обрыв тока), как изображено на рис. 1. В результате чего магнитное поле скачком проникает в отверстие кольца. При последующем снижении внешнего поля экранирующий ток остается малым, и поле в отверстии кольца не захватывается.

Методом холловского сканирования по визуализации захваченного магнитного поля B_{tr} обнаружено, что распределение B_{tr} имеет С - образную форму (рис. 2) [4]. Область тела кольца с низким значением B_{tr} – это сектор обрыва тока (СОТ), формирующийся в результате локального перегрева в области с наименьшим критическим током.

Неоднородность плотности критического тока J_c всегда существует в силу кристаллической анизотропии YBCO [5]. Численными методами изучена динамика проникновения импульсного магнитного поля в ВТСП кольцо. Выполненный расчет с анизотропией 5–10% позволил объяснить картину B_{tr} . Показано, что за счет неоднородности J_c образуется СОТ.

Расчет выполнен для коротких импульсов в условии адиабатичности процесса. Для описания электродинамики ВТСП используется степенной закон, связывающий его удельное сопротивление ρ_{sc} и плотность тока J :

$$\rho_{sc} = E_0 \cdot \left(\frac{J}{J_c} \right)^n \div J \quad (1)$$

где $E_0 = 1$ мкВ/см – уровень электрического поля, являющийся критерием J_c , $n = 20$ – показатель степени.

Сравнение геометрий остаточных полей B_{tr} показывает хорошее согласие расчетов с экспериментами (рис. 2). При высоких скоростях нарастания поля в секторе с минимумом J_c наблюдается обрыв экранирующего тока, и магнитное поле проникает в кольцо по узкому сектору, который нагревается выше критической температуры. Остальная часть кольца остается сверхпроводящей. Экранирующие токи, формирующие остаточное магнитное поле, текут по С – образному контуру, и не затекают в перегретую область.

Разработанная модель позволяет в ходе импульсного намагничивания исследовать динамику неоднородного проникновения магнитного поля, распределение экранирующих токов и температур в кольце.

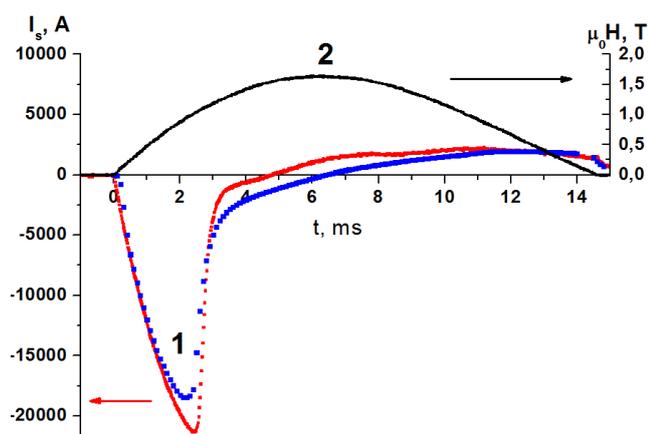


Рис. 1. 1 – Эволюция экранирующего тока: красная кривая – эксперимент [4], синяя кривая – расчет; 2 – осциллограмма намагничивающего поля

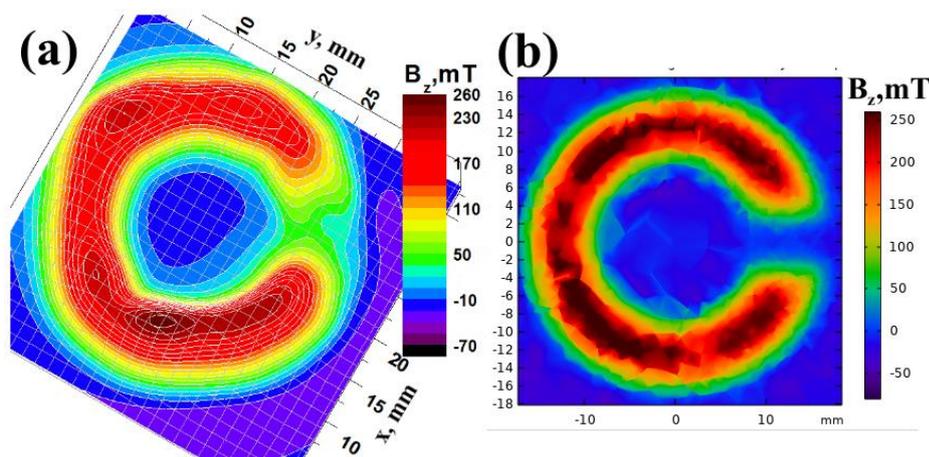


Рис. 2. Распределение осевой компоненты захваченного магнитного поля B_z в плоскости 1 мм над кольцом после импульса амплитудой $\mu_0 H_a = 1.65$ Тл: (a) – экспериментальные результаты [4]; (b) – расчет для кольца с анизотропией J_c

Литература

1. Fujishiro H., Naito T. Simulation of temperature and magnetic field distribution in superconducting bulk during pulsed field magnetization // Supercond. Sci. Technol. 2010. V. 23. P. 105021.
2. Krabbes G. et al. High Temperature Superconductor Bulk Materials. – Weinheim: WILEY-VCH GmbH&Co, 2006. P. 134.
3. Korotkov V. S., Krasnoperov E.P., Kartamyshev A.A. Flux jumps at pulsed field magnetization // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. 2016. V. 29. P. 1893.
4. Brazhnik P. A., Krasnoperov E.P. Visualization of the field Penetration the shielding current break and its restoration in the pulse magnetized YBCO ring // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. 2021. V. 34. P. 1085.
5. Ainslie M.D. et al. Modelling and comparison of trapped fields in (RE) BCO bulk superconductors for activation using pulsed field magnetization // Supercond. Sci. Technol. 2014. V. 27. P. 065008.

УДК 538.945

Исследование нового интерметаллического сверхпроводника $\text{Mo}_4\text{Ga}_{20}\text{Sb}$ методом ЯМР-спектроскопии

Д.А. Ярыгина¹, С.В. Журенко², А.В. Ткачев², А.В. Гунбин², В.Ю. Верченко¹, А.А. Гуппиус^{1,2}

¹МГУ им. М.В.Ломоносова

²ФИАН им. П.Н. Лебедева

Интерметаллический сверхпроводник $\text{Mo}_4\text{Ga}_{20}\text{Sb}$ представляет интерес для исследования, так как свойства его сверхпроводящего состояния отклоняются от предсказаний теории БКШ ($\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c} = 3.65$ вместо 3.52). Также для $\text{Mo}_4\text{Ga}_{20}\text{Sb}$ характерны сильная электрон-фононная связь и, по некоторым данным, многощелевая сверхпроводимость [1, 2]. Соединение $\text{Mo}_4\text{Ga}_{20}\text{Sb}$ удобно для исследования, так как из всего семейства галлидов молибдена у него наблюдается наибольшая критическая температура $T_c = 6.6$ К. [3]

Для исследования использовались методики спектроскопии ядерного магнитного резонанса, а именно ЯКР-спектроскопия. Для соединения $\text{Mo}_4\text{Ga}_{20}\text{Sb}$ метод ЯКР является оптимальным для исследования сверхпроводящего состояния, так как второе критическое поле для этого соединения мало ($H_{c2} = 0.7$ Тл [3]). Метод спектроскопии ядерного квадрупольного резонанса имеет высокую чувствительность к особенностям электронного распределения, магнитному состоянию иона и его локальному окружению. С его помощью можно эффективно и подробно исследовать кристаллическую и магнитную структуру, электронные свойства изучаемых соединений.

В ходе исследования были проведены измерения спектров ЯКР ^{69}Ga и ^{71}Ga в $\text{Mo}_4\text{Ga}_{20}\text{Sb}$ при $T_c = 4.2$ К и измерения скорости спин-решеточной релаксации в диапазоне температур 1.9–300 К. Спектр ЯКР $^{69,71}\text{Ga}$ $\text{Mo}_4\text{Ga}_{20}\text{Sb}$ содержит 4 пары линий, соответствующих 4 неэквивалентным позициям

изотопов Ga. Отношения частот в каждой паре соответствует отношению квадрупольных моментов $\frac{Q_{69Ga}}{Q_{71Ga}} = 1.6$. Выше T_C наблюдается четко выраженный закон Корринги с величиной $\frac{1}{T_1 T} = 2.63 \text{ (с}\cdot\text{K)}^{-1}$.

Рассчитанное отношение Корринги $S = \frac{4\pi k_B T_1 T K_s^2 \gamma_n^2}{h \gamma_e^2} = 0.52$, значение $S < 1$ указывает на наличие неко-

торых антиферромагнитных корреляций в системе. Ниже T_C наблюдается четко выраженный интенсивный гебель-сликтеровский пик. Экспериментальное наблюдение этого пика свидетельствует о том, что для данного соединения характерна сверхпроводимость s-типа без точек или линий зануления в k -пространстве (full gap s-type).

На рис. 1 приведены зависимость скорости спин-решеточной релаксации от температуры в диапазоне температур 1–10 К и симуляционные кривые для одной щели s-типа, одной щели s-типа с учетом антиферромагнитных корреляций и двух щелей s-типа с учетом антиферромагнитных корреляций. Видно, что кривая с одной щелью s-типа дает систематическое расхождение в низкотемпературной области и области гебель-сликтеровского пика, где она выглядит слишком пологой. Также следует отметить, что аппроксимация низкотемпературной части активационной зависимостью дает значение ширины сверхпроводящей щели 9.49 К. Это значение несколько меньше оценки щели 12.045 К [3], полученной из скачка теплоемкости. Учет антиферромагнитных корреляций позволил улучшить соответствие с экспериментальными данными в области гебель-сликтеровского пика. Тем не менее остается расхождение в низкотемпературной области, что приводит к необходимости добавления функции второй щели. Полученная кривая демонстрирует хорошее согласование с экспериментальными данными во всем температурном диапазоне ниже T_C . Симуляция проведена с использованием величин щели 13 К и 6 К и относительными весами 0.8 и 0.2 соответственно. Таким образом, средневзвешенная величина щели 11.6 К достаточно хорошо согласуется с литературной оценкой 12.045 К [3].

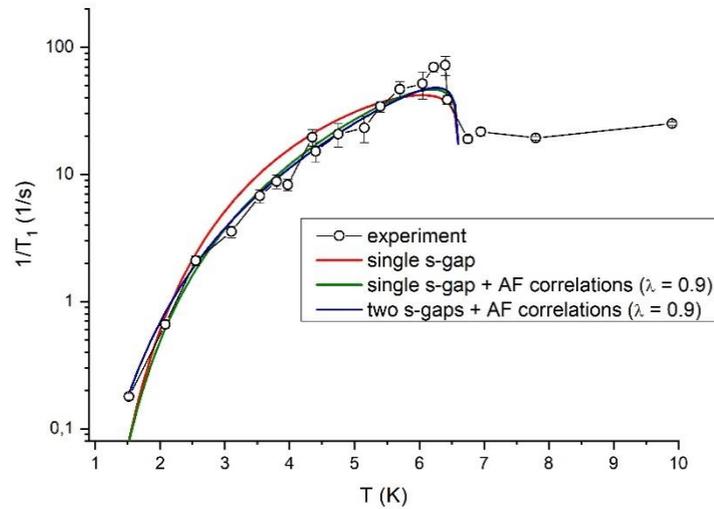


Рис. 1. Зависимость скорости спин-решеточной релаксации от температуры в диапазоне температур 1–10 К в координатах $\frac{1}{T_1}(T)$ и симуляционные кривые для одной щели s-типа (красная кривая), одной щели s-типа с учетом антиферромагнитных корреляций (зеленая кривая) и двух щелей s-типа с учетом антиферромагнитных корреляций (синяя кривая)

Литература

1. Verchenko V. Y. et al. Strong electron-phonon coupling in the intermetallic superconductor $\text{Mo}_8\text{Ga}_{41}$ // Phys. Rev. B 93. 064501. 2016.
2. Marcin M. et al. One or two gaps in $\text{Mo}_8\text{Ga}_{41}$ superconductor? Local Hall-probe magnetometry study // Superconductor Science and Technology. 34. 035017. 2021.
3. Verchenko V. Y. et al. Family of $\text{Mo}_4\text{Ga}_{21}$ -based superconductors // Chemistry of Materials. 32. 6730–6735. 2020.

Температурная и размерная зависимость поля необратимости слоистого высокотемпературного сверхпроводника с дефектами

А.А. Михайлов, М.М. Мартьянов, А.Н. Мороз, А.Н. Максимова

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

В рамках модели слоистого высокотемпературного сверхпроводника (ВТСП) методом Монте-Карло для вихревой системы [1, 2] исследована зависимость поля необратимости сверхпроводника, содержащего центра пиннинга заданной конфигурации, от его размеров и температуры. Также исследовалась динамика вихревой системы в неоднородном температурном поле. Рассчитаны вихревые конфигурации, возникающие при локальном повышении температуры сверхпроводника, проанализировано влияние на данные конфигурации величины градиента температуры.

Поле необратимости является важной для практики величиной, поскольку определяет магнитное поле, при котором ширина петли и, как следствие, критический ток, обращается в 0. В [3, 4] исследованы зависимости поля необратимости от температуры, допирования и примесей. Численные методы в применении к данной задаче приобретают важное значение, поскольку позволяют менять температуру, характер и концентрацию дефектов в широких диапазонах и анализировать влияние различных факторов.

Модель слоистого ВТСП развита на основе модели Лоренса–Дониака [5] и описывает вихревую нить как стопку двумерных слоевых вихрей – панкейков. Для большинства задач допустимо пренебречь межплоскостным взаимодействием и рассматривать один ВТСП-слой. Алгоритм расчета включает подпроцессы движения, рождения и уничтожения на границе вихревых нитей, а также аннигиляцию вихрей противоположного знака. В настоящей работе в модель также было введено неоднородное распределение температуры по образцу.

Для расчёта были выбраны параметры, соответствующие параметрам слоистого ВТСП $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+d}$: $d = 2,7\text{\AA}$ – толщина сверхпроводящего слоя, $\lambda(T = 0) = 1800\text{\AA}$ – глубина проникновения внешнего магнитного поля в сверхпроводник, $T_c = 84\text{K}$ – критическая температура, $\xi = 20\text{\AA}$ – длина когерентности. Максимальная амплитуда внешнего поля при перемагничивании составила 1100 Гс. Дефекты вводились в расчет в виде одинаковых потенциальных ям размером $\sim x$. Концентрация дефектов выбрана $\sim 10^9 \text{ см}^{-2}$.

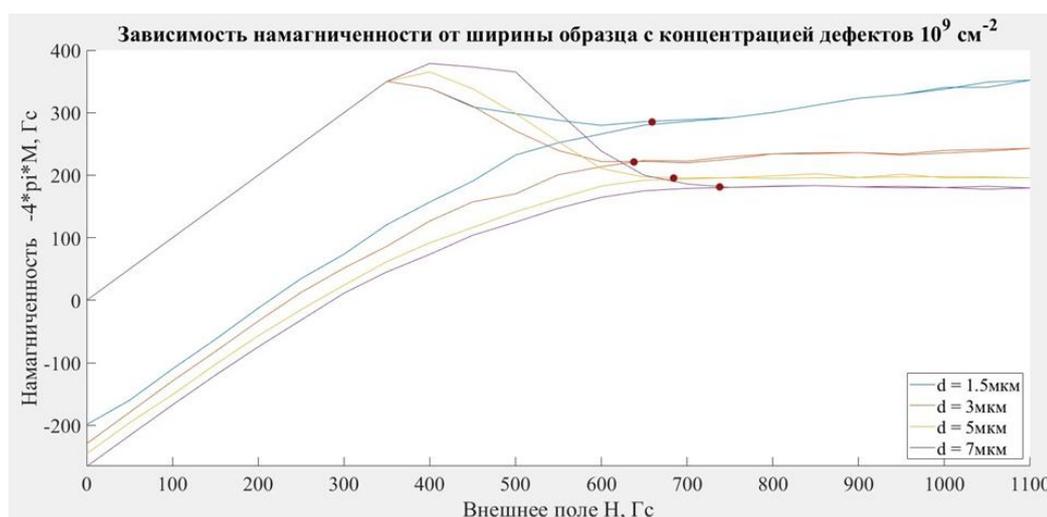


Рис. 1. Кривые намагниченности при различной ширине образца. Точками показано поле необратимости

В ходе работы были рассчитаны кривые намагниченности при различной ширине образца (размер в направлении входа вихрей в сверхпроводник через границу). Ширина пластины менялась от 1.5 до 7 мкм. Некоторые из полученных кривых намагниченности приведены на рис. 1. Видно, что при

выбранной концентрации центров пиннинга величина поля необратимости (поле необратимости показано на рисунке стрелками) не зависит от размеров образца. Заметим, что выбранные размеры образца совпадают по порядку величины с характерным размером гранул в гранулированных ВТСП [6].

Также в расчет были введены локальные области с повышенной температурой. Такая область может появиться при лавинообразном срыве вихрей с дефектов или при попадании в сверхпроводник гамма-кванта или заряженной частицы (связанные с этим эффекты используются при создании детекторов [7]). Распределение температуры принято гауссовским, температура меняется на расстояниях порядка размера образца. Максимальная температура в центре. На рис. 2 показана рассчитанная средняя плотность вихрей. Видно, что концентрация вихрей растет от центра к краю пластины и в области с повышенной температурой наблюдается интенсивное движение вихрей.

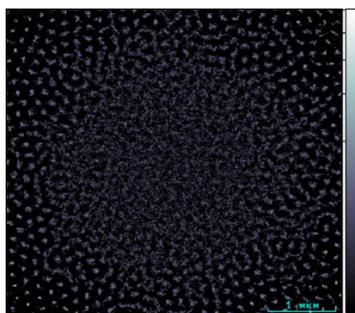


Рис. 2. Картина распределения вихрей в поле $H = 800$ Гс при нормально распределённой температуре. Температура в центре, в углах и в центре краёв 15К, 0,6К и 3К соответственно. В данной системе было 876 шагов

Литература

1. *Кашурников В.А., Красавин А.В.* Вычислительные методы в квантовой физике: учебное пособие. Троицк: Типография издательства «Горвант», 2005, 412 с.
1. *Шмидт В.В.*, Введение в физику сверхпроводников. Изд. 2-е, испр. и доп. М.: МЦНМО, 2000, 402 с.
2. *Bustamante D.A., et al.* The irreversibility line and Curie-Weiss temperature of the superconductor $\text{LaCaBaCu}_3\text{x}(\text{BO}_3)\text{x}$ with $x = 0.2$ and 0.3 // *Physics Procedia* 36, 2012, 354–359 с.
3. *Dawood A., et al.* The doping dependence of the irreversibility line in grain-aligned $\text{Sm}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ high- T_c superconductor // *Current Applied Physics* 10, 2010, 1345–1348 с.
4. *Lawrence W.E., Doniach S.* Proceedings of LT12. Tokyo: Keigaku, 1971, 361 с.
5. *Senoussi S.* Review of the critical current densities and magnetic irreversibilities in high T_c superconductors // *J. Phys. III France* 2, 1992. P. 1041–1257.
6. *de Visser P. J., de Rooij S.A., Murugesan V., Thoen D.J., Baselmans J.J.* Phonon-Trapping-Enhanced Energy Resolution in Superconducting Single-Photon Detectors // *Physical Review*, 2021, 15 с.

УДК 538.945.9

Структура и свойства магнитного сверхпроводника Eu-1144

А.Ю. Дегтяренко^{1,2}, В.А. Власенко², И.А. Каратеев³, А.В. Овчаров³, К.С. Перваков^{1,2}

¹Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В.Л. Гинзбурга
ФИАН

²Объединённый институт высоких температур РАН

³НИЦ «Курчатовский институт»

В настоящее время значительный интерес представляют железосодержащие сверхпроводники системы 1144 - $\text{AeAFe}_4\text{As}_4$ ($\text{Ae} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Eu}$ и $\text{A} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) [1]. Соединения системы 1144, как правило, растут в схожих условиях и сосуществуют со своей родственной фазой 122 - AFe_2As_2 . Среди остальных соединений системы 1144, железосодержащий сверхпроводник $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ обладает рядом уникальных свойств, таких как сосуществование магнитного упорядочения при $T_m \approx 15$ К, что значительно ниже критической температуры сверхпроводящего перехода $T_c \approx 36$ К, и верхнее критическое магнитное поле B_{c2} составляет порядка 100 Тл. [2].

Цель данной работы заключалась в исследовании синтезированных методом «self-flux» [3] монокристаллов $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ с $T_c \approx 36$ К методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (ВРПЭМ). В данной работе на основе анализа ВРПЭМ наблюдалась несверхпроводящая фаза Eu-122 (~5,6%), что согласуется с работой [4], где также были обнаружены включения слоев 122 в объеме CaK-1144. Однако в соединении $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ включения не являются сверхпроводящими, поэтому не наблюдается второго пика намагниченности (в отличие от CaK-1144 в поле $H//ab$) на петлях магнитной необратимости. Сделан вывод, что дефекты несверхпроводящей фазы Eu-122 во внешнем магнитном поле $//ab$ имеют двумерную структуру. Предполагается, что дефекты Eu-122 в соединении $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ могут действовать как двумерные центры пиннинга.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-12-00394) с использованием оборудования Центра коллективного пользования ФИАН.

Литература

1. Iyo A. et al. New - Structure - Type Fe-based superconductors: $\text{CaAFe}_4\text{As}_4$ ($A = \text{K, Rb, Cs}$) and $\text{SrAFe}_4\text{As}_4$ ($A = \text{Rb, Cs}$) // *J. Am. Chem. Soc.* 2016, V. 138, N 10, P. 3410–3415.
2. Bristtow M. et al. Competing pairing interactions responsible for the large upper critical field in a stoichiometric iron-based superconductor $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ // 2020, *PhysRevB.*, V. 101, N 134502.
3. Vladimir Vlasenko et al. Vortex pinning and magnetic phase diagram of $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ iron-based superconductor // *Supercond. Sci. Technol.* 2020. V. 33 N 084009.
4. Ataru Ichinose et al. Elucidating the origin of planar defects that enhance critical current density in $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ single crystals // *Supercond. Sci. Technol.* 2021. V. 34, N 034003.

УДК 537.945.9

Сверхпроводящий соленоид из ВТСП ленты второго поколения

В.Г. Франц¹, Н.Н. Балашов², А.Ю. Дегтяренко^{2,3}, П.Н. Дегтяренко^{2,4}, В.В. Желтов², К.Л. Ковалев^{1,2}

¹Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

³Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В.Л. Гинзбурга
ФИАН

⁴ООО «С-Инновации»

В настоящее время устройства на основе сверхпроводящих материалов представляют большой интерес. Благодаря значительному увеличению эксплуатационных характеристик высокотемпературных сверхпроводящих (ВТСП) лент 2-го поколения [1] эти материалы становятся наиболее подходящими для использования их в электрофизическом оборудовании.

Целью данной работы является разработка и исследование сверхпроводящего соленоида галетного типа на 2 Тл. В качестве сверхпроводящего материала будет использована ВТСП лента 2-го поколения производства компании ООО «С-Инновации». Ленты произведены методом импульсного лазерного осаждения промышленным способом. Исследовались два типа ленты, первый тип – ленты, используемые для высоких диапазонов температур и низких значений полей [2] и второй тип, ленты, используемые для низких диапазонов температур и высоких значений полей [1]. Сверхпроводящие характеристики ВТСП лент 2-го поколения, измерялись на установке Quantum Design (PPMS) в магнитных полях до 9 Тл в диапазоне температур от 20 до 77К. Полевые зависимости лифт-фактора (отношение критического тока во внешнем магнитном поле к критическому, измеренному при нахождении образца в собственном магнитном поле) представлены на рис. 1. На основании полученных результатов исследования и расчетов конструкции для разработки соленоида был отобран второй тип лент. Расчет магнитного поля производился с помощью программного обеспечения, разработанного в ОИВТ РАН. Каркас соленоида будет выполнен из стеклотекстолита. По предварительным расчетам сверхпроводниковый соленоид будет состоять из 10 разделенных секций двойных галет, для обеспечения охлаждения, соединенных последовательно. Внутренний и внешний диаметры галет составляют $d = 120$ мм и 220 мм, соответственно. Число витков ВТСП ленты шириной 12 мм в одной галете $n = 850$. Расчетное магнитное поле при заданных параметрах составляет 2,077 Тл при токе 60 А. Полученные результаты будут использованы для экспериментальных исследований магнитных свойств сверхпроводящих материалов в ОИВТ РАН.

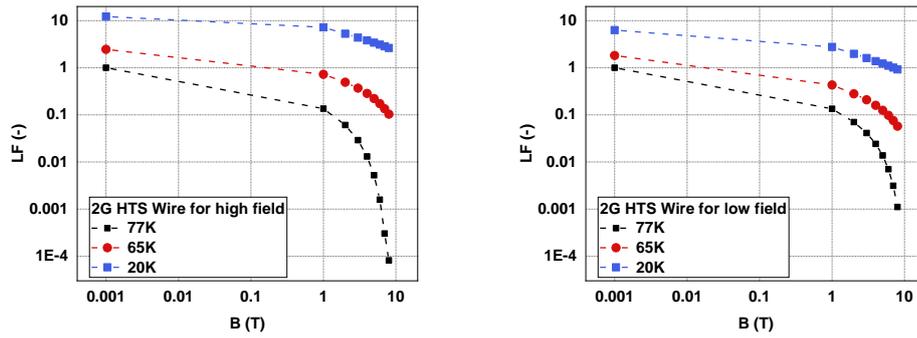


Рис. 1. Полевые зависимости лифт-фактора в магнитных полях до 9 Тл

Литература

1. *Molodyk A. et al.* Development and large volume production of extremely high current density YBaCu_3O superconducting wire for fusion // *Sci. ReP.* 2021 V. 11, N 2084.
2. *Degtyarenko P. et al.* Influence of gadolinium stoichiometry on the superconducting properties of industrial 2G HTS wire in magnetic field // *Abstract Book of International conference on Magnet Technology, 22-27 September 2019, Vancouver, Canada.*

Секция современных проблем теоретической физики и физики конденсированного состояния

УДК 538.945

Латеральный эффект Джозефсона на поверхности магнитного вейлевского полуметалла $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$

О.О. Швецов, В.Д. Есин, Ю.С. Бараиш, А.В. Тимонина, Н.Н. Колесников, Э.В. Девятков

Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН

В работе экспериментально исследован транспорт заряда между двумя сверхпроводящими контактами на поверхности магнитного вейлевского полуметалла [1]. В случае неоднородно намагниченного образца наблюдается андреевское отражение с конечным сопротивлением. В состоянии с однородной намагниченностью образца становится возможным протекание бездиссипативного джозефсоновского тока. Мы обнаружили, что эффект Джозефсона в состоянии с однородной намагниченностью может возникать даже на больших расстояниях между контактами (5 мкм).

Мы связываем такое поведение с возникновением спин-триплетной сверхпроводимости, индуцированной в топологическом поверхностном состоянии [1] магнитного вейлевского полуметалла $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$. Когда намагниченность образца неоднородна, на длине джозефсоновского перехода присутствуют домены (характерный размер для $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ составляет 1 мкм). Для поверхностного состояния это означает, что на доменной стенке меняется знак киральности, что приводит к значительному рассеянию с переворотом спина, поэтому эффект Джозефсона оказывается подавлен в состоянии с неоднородной намагниченностью.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 19-02-00203).

Литература

1. *Armitage N.P., Mele E.J., Vishwanath A.* Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids // *Rev. Mod. Phys.* 2018 V. 90. P. 015001.

ДК 538.935

Проводимость и термоэлектрические коэффициенты допированного титаната стронция при высоких температурах

Х.Г. Назарян¹, М.В. Фейгельман^{2,1}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау

Развита теория проводимости и термоэлектрических эффектов в допированном титанате стронция SrTiO_3 в невырожденной области температур $k_B T \gg E_F$. Главным источником диссипации предполагается рассеяние электронов на мягких поперечных оптических фононах, связанных с близостью этого материала к сегнетоэлектрическому переходу. Мы использовали кинетическое уравнение в приближении времени релаксации и определили зависящее от энергии время релаксации $\tau(E)$ через метод итераций. Используя эффективную массу электрона m и константу взаимодействия электрона с поперечными фононами λ в качестве двух подгоночных параметров, мы смогли количественно описать температурные зависимости удельного сопротивления $R(T)$ и коэффициента Зеебека $S(T)$ для широкого диапазона электронных плотностей, исследованных экспериментально в недавней работе [1]. Кроме того, мы рассчитали отношение Нернста в линейном приближении по слабому магнитному полю в том же диапазоне температур.

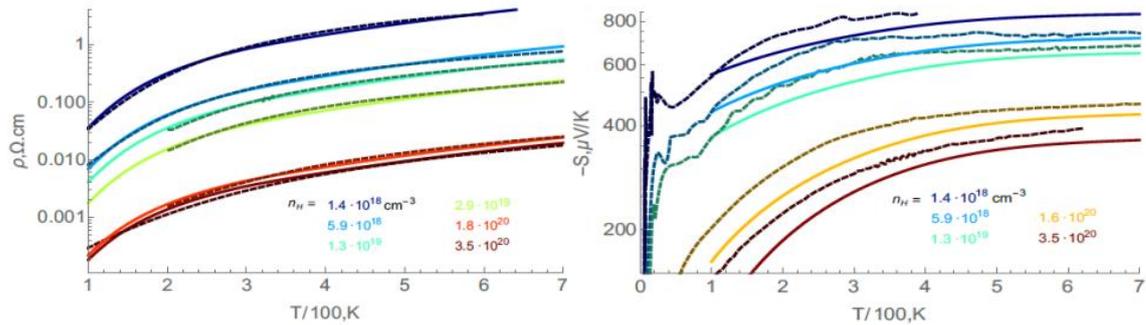


Рис. 1. Сравнение экспериментальных (пунктирные) и теоретических (сплошные) кривых для сопротивления (слева) и коэффициента Зеебека (справа)

Разбавленный трехмерный металл, образующийся из зонного изолятора титаната стронция (STO) из-за крошечного легирования (10^{-6} – 10^{-4} электронов проводимости на элементарную ячейку), демонстрирует ряд довольно необычных свойств [2, 3]. Их основная общая причина – необычно сильное приближение изолирующего STO к сегнетоэлектрическому переходу, что приводит к гигантской низкотемпературной диэлектрической проницаемости $\epsilon_0 \approx 20\,000$. В результате кулоновское взаимодействие между электронами проводимости практически исчезает, и стандартная феноменология, разработанная в теории нормальных металлов, неприменима. Низкая плотность электронов проводимости n и возможность её подстраивания позволяют изучать транспортные свойства легированного STO в различных температурных режимах, от сильно вырожденного ферми-газа при $k_B T \ll E_F$ до сильно невырожденного при $k_B T \gg E_F$, где E_F – энергия Ферми.

В настоящей работе мы теоретически пересматриваем вопрос об электропроводности и термоэлектрическом отклике в невырожденном электронном газе, взаимодействующем с мягкими поперечными оптическими фононами. Этот тип фононов существует в STO из-за близости к сегнетоэлектрическому переходу. Мы используем подход кинетического уравнения в форме в приближении времени релаксации и выражаем как удельное сопротивление $R(T)$, так и коэффициент Зеебека $S(T)$ через зависящее от энергии время транспортного рассеяния $\tau(E; T)$.

Наша цель – развить простую модель рассеяния электронов, приводящую к хорошему согласию с данными в высокотемпературной области $k_B T \gg E_F(n)$ как для проводимости $\sigma(T)$, так и для коэффициента Зеебека $S(T)$. Итак, мы развиваем полуколичественную теорию, основанную на простейшей модели параболического электронного спектра $E(p) = p^2/2m$ с зависящей от температуры эффективной массой $m = m(T)$.

Результаты проделанной работы очень хорошо описывают экспериментальные данные для сопротивления и коэффициента Зеебека с относительной ошибкой меньше 10% во всём изучаемом диапазоне температур и для всех концентраций одновременно (см. рис. 1).

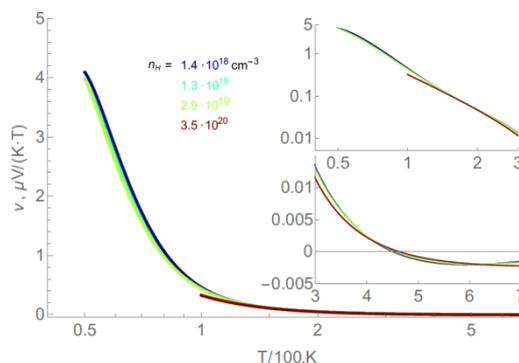


Рис. 2. Теоретические предсказания для поведения коэффициента Нернста

Также, мы смогли теоретически предсказать поведение коэффициента Нернста в невырожденной области температур (рис. 2). Он перестаёт зависеть от температуры при $T > 150$ К, а при 450 К меняет свой знак.

Литература

1. Collignon C., Bourges P., Fauque B., et al. Phys. Rev. X. 2020, 10, 031025.

2. *Gastiasoro M.N., Ruhman J., Fernandes R.M.* Superconductivity in dilute SrTiO: a review // *Annals of Physics*, 2020, 417, 168107.
3. *Collignon C., Lin X., Rischau C.W., et al.* *Annual Review of Condensed Matter Physics*. 2019, 10, 25.

УДК 538.911

Механическое отшелушивание двумерных кристаллов на примере WSe₂ и графена

А.И. Дулебо¹, М. В. Пузачев¹, М. А. Акмаев¹, А. Ю. Кунцевич¹

¹ Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Для использования функционала двумерных кристаллов необходимо получать монослои больших латеральных размеров и высокого структурного совершенства [1]. Существует два пути получения чешуек: выращивание на подготовленной подложке и расслаивание объёмного кристалла [2]. В исследовательских целях чаще используется второй метод, так как он универсальный. Для получения монослоёв расслаиванием объёмного кристалла приходится идти на компромисс между качеством и размером итоговых чешуек [3].

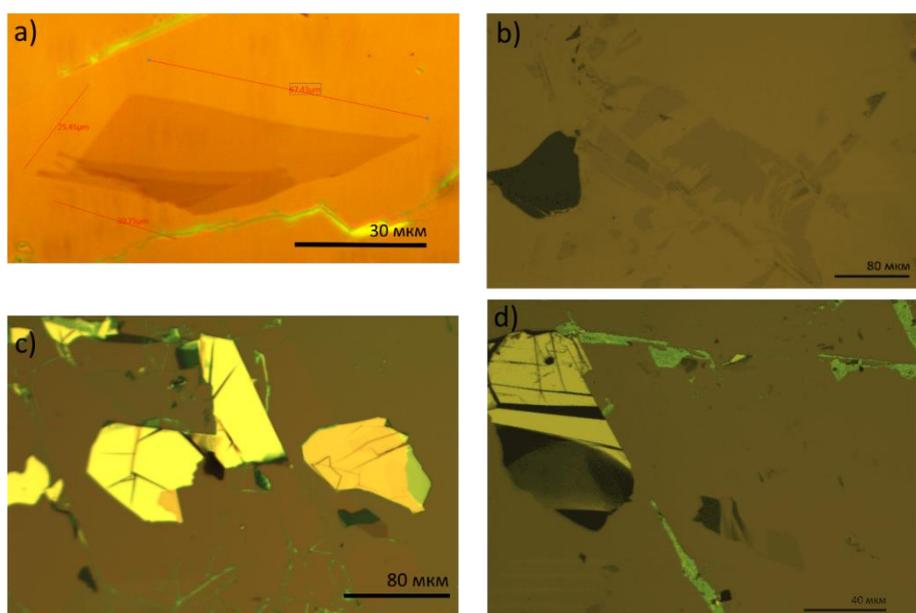


Рис. 1. Фото чешуек графита с включениями графена, полученных различными способами механического отшелушивания: модификация подложки кислородной плазмой (а), МАЕ (b), с помощью скотча (с–d)

Работа посвящена оптимизации получения монослоёв методами механического отшелушивания. Испытан метод отшелушивания чешуек скотчем. Продемонстрирован metal-assisted exfoliation метод (МАЕ, метод отшелушивания с использованием металла в качестве скотча), основанный на сильном взаимодействии между металлом и кристаллом. Испробован способ модификации подложки в кислородной плазме [3]. Проведено сравнение спектров фотолуминесценции образцов WSe₂, полученных МАЕ методом и отшелушиванием с помощью скотча. Проанализированы спектры комбинационного рассеяния полученных образцов. Для графена, полученного металлизированным методом проведены исследования с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) и транспортные измерения.

В результате были подобраны оптимальные параметры для МАЕ метода, которые позволяют воспроизводимо получать чешуйки размерами ~100 мкм (рис. 1). Полученные значения подвижности в графене (~2000 см²/(В·с) при 4К) говорят о загрязненности образца, что подтверждается АСМ- топографией (рис. 2). Наличие пиков фотолуминесценции образцов WSe₂, полученных МАЕ методом указывает на прямозонную структуру полупроводника и монослойность чешуек. Наблюдается уширение и разделение пика на трионный и экситонный в сравнении с кристаллом, полученным методом скотча. (рис. 2).

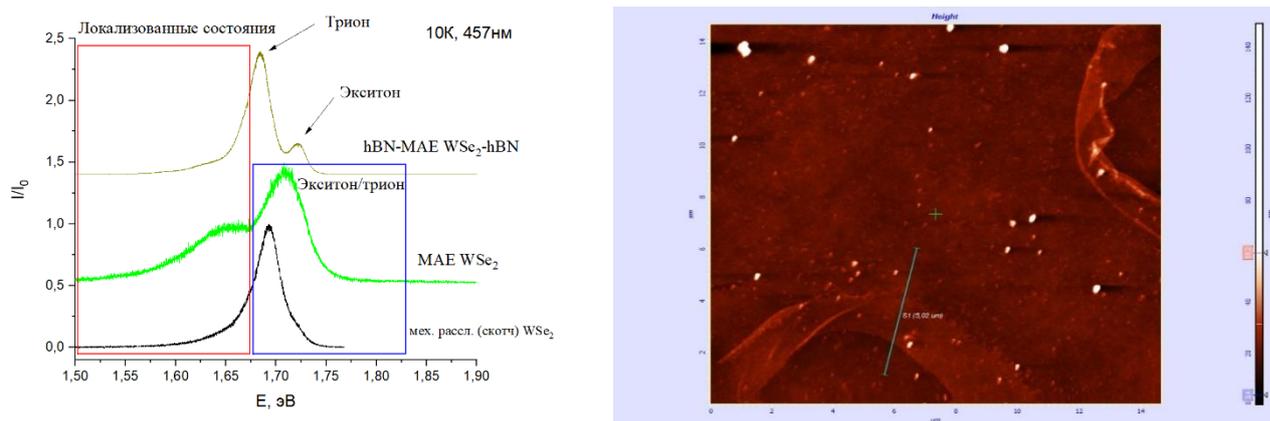


Рис. 2. Сравнение спектров низкотемпературной ФЛ чешуек WSe₂(слева), АСМ-топография мостика Холла из графена, высота чешуйки ~0.76нм (справа)

Литература

1. *Konstantin Novoselov et al.* Two-dimensional crystals-based heterostructures: materials with tailored properties // Phys. Scr. V. 2012. N T. 146.
2. *Konstantin Novoselov et al.* Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films // Science V. 306. P. 666.
3. *Xisai Zhang et al.* Advanced Tape-Exfoliated Method for Preparing Large-Area 2D Monolayers: A Review // 2D materials. V. 8. P. 3

УДК 538.945

Взаимодействие неелевского скирмиона и пирловского вихря

Е.С. Андрияхина^{1,2}, И.С.Бурмистров^{2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау (РАН)

³Международная лаборатория физики конденсированного состояния,
«Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ)

Гибридные структуры сверхпроводник–ферромагнетик, содержащие вихри и скирмионы, представляют собой новую область взаимодействия между сверхпроводимостью и магнетизмом [1–6]. Мы изучаем взаимодействие неелевского скирмиона и пирловского вихря в тонких гетероструктурах (рис. 1) за счет полей рассеяния [7].

Нами был найден мейсснеровский ток (рис. 2) в сверхпроводящей плёнке, индуцируемый присутствием скирмиона, а также изучена энергия взаимодействия пирловского вихря и скирмиона за счёт полей рассеяния.

Исследование этой энергии приводит к наблюдению интересного «королевского» эффекта, т.е. зависимости взаимного расположения скирмиона и вихря от знака постоянной Дзялошинского–Моррии. Стоит отметить, что в изученной ранее системе из блоховских скирмионов и вихрей в тонкой сверхпроводящей плёнке, подобного эффекта не наблюдалось: вихри в любой конфигурации располагались точно под центрами скирмионов [8]. Рассмотрено обратное влияние вихря на скирмион. Было показано, что магнитное поле вихря стабилизирует скирмион, увеличивая его радиус [7]. Более того, скирмион в такой гетероструктуре может образоваться даже в отсутствие антисимметричного вклада от взаимодействия Дзялошинского–Моррии, которое стабилизирует скирмион в изолированных плёнках.

Наша теория находится в качественном согласии с результатами недавней экспериментальной работы [1], в которой впервые была доказана возможность спонтанного рождения пары вихрь–антивихрь в тонкой сверхпроводящей пленке в присутствии скирмиона. Авторы изучали гетероструктуру FIS (королевский ферромагнетик–изолятор–сверхпроводник), состоящую из слоя Nb и мультислоев [IrFeCoPt]¹⁰, разделенных 5 нм изолирующим MgO. В данной работе авторы отслеживают зависимость полного магнитного момента сверхпроводника $M_{super}(H)$ от магнитного поля H . Ниже некоторого критического поля H_{nuc} магнитные скирмионы зарождаются внутри F-пленки. Этот процесс также приводит к резкому изменению $M_{super}(H)$ в сторону отрицательных значений. Сравнивая поведение

намагниченности $M_{super}(H)$ в изолированном S-образце и в гетероструктуре FIS, авторы приходят к выводу о рождении пары вихрь–антивихрь.

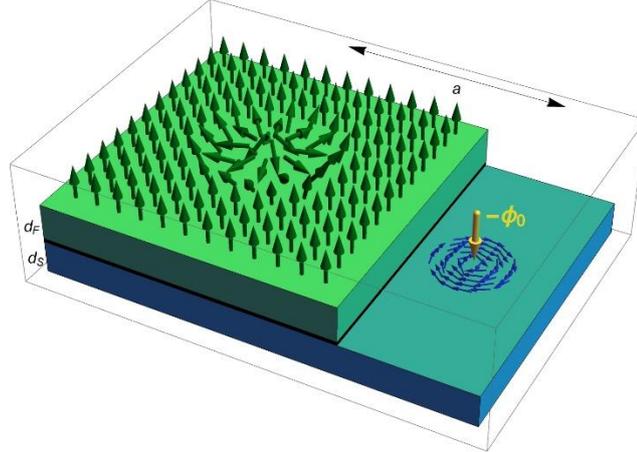


Рис. 1. Эскиз гетероструктуры ферромагнетик (зеленый) – сверхпроводник (синий), разделенных тонким изолирующим слоем (черный), который подавляет эффект близости. В ферромагнитном слое находится скирмион типа Нееля. Схематично показан магнитный профиль скирмиона с положительной киральностью. В сверхпроводящем слое на некотором расстоянии a от центра скирмиона находится вихрь. Вихрь схематично показан синими линиями, желтая стрелка указывает направление его магнитного потока. d_F и d_S обозначают ширину ферромагнетика и сверхпроводящей пленки соответственно

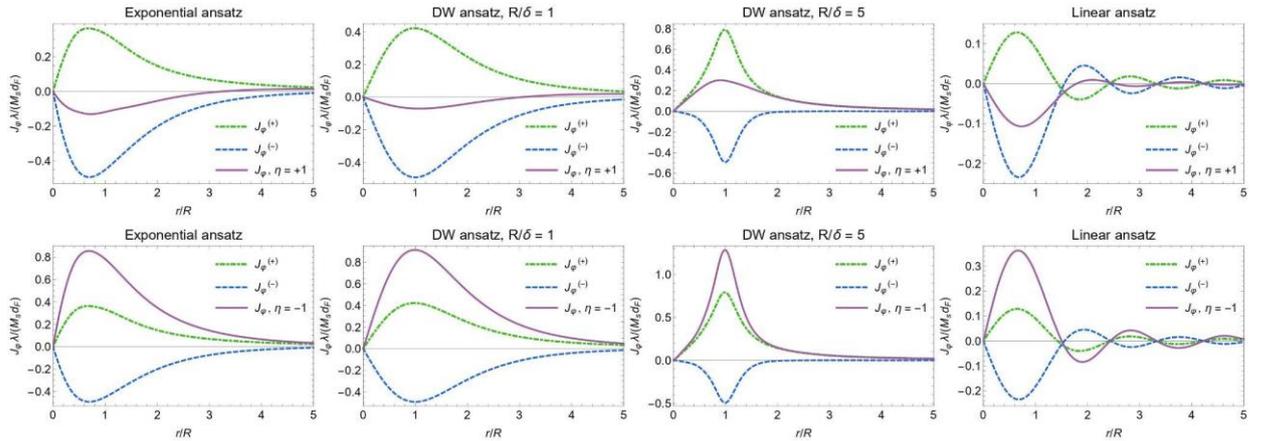


Рис. 2. Зависимость азимутальной компоненты кирально-независимой $J_{\varphi}^{(+)}$ и кирально-зависимой $J_{\varphi}^{(-)}$ частей тока и полного сверхтока J_{φ} от расстояния от центра скирмиона r , отнесенного к радиусу скирмиона R , для случаев положительной (верхний ряд) и отрицательной (нижний ряд) киральностей $\eta = \pm 1$. Параметры: $d_S/\lambda_L = 0.01$, $d_F/\lambda_L = 0.005$ и $R/\lambda_L = 3$. Сверхток рассчитывается для различных анзацев скирмионного профиля: экспоненциального, доменной стенки (DW) и линейного анзаца. В обозначениях выше λ_L – лондоновская глубина проникновения магнитного поля в сверхпроводник

Литература

1. Petrović A.P., Raju M., Tee X.Y., Louat A., Maggio Aprile I., Menezes R.M., J. Wyszynski M., Duong N.K., Reznikov M., Renner C., Milosević M.V., and Panagopoulos C., Skyrmion-(Anti)vortex coupling in a chiral magnet superconductor heterostructure // Phys. Rev. Lett., 126, 117205, (2021).
2. Ryazanov V. V., Oboznov V. A., Prokofiev A.S., Bolginov V. V., and Feofanov A.K., Superconductor-ferromagnet-superconductor π -junctions // J. Low Temp. Phys. 136, 385 (2004).
3. Lyuksyutov I.F. and Pokrovsky V. L., Ferromagnet-superconductor hybrids // Adv. Phys. 54, 67 (2005).
4. Buzdin A.I., Proximity effects in superconductor-ferromagnet heterostructures // Rev. Mod. Phys. 77, 935 (2005).
5. Bergeret F.S., Volkov A.F., and Efetov K.B., Odd triplet superconductivity and related phenomena in superconductor-ferromagnet structures // Rev. Mod. Phys. 77, 1321 (2005).
6. Eschrig M., Spin-polarized supercurrents for spintronics: A review of current progress // ReP. Prog. Phys. 78, 104501 (2015).
7. Andriyakhina E.S. and Burmistrov I.S., Interaction of a Néel-type skyrmion with a superconducting vortex // Phys. Rev. B. 103, 174519 (2021).
8. Dahir S.M., Volkov A.F., and Eremin I.M., Interaction of Skyrmions and Pearl Vortices in Superconductor-Chiral Ferromagnet Heterostructures // Phys. Rev. Lett. 122, 097001, (2019).

Волны в двумерном когерентном вихре

Н.А. Ивченко^{1,2}, С.С. Вергелес¹

¹Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Изучается турбулентность в двумерной гидродинамике, которая может реализовываться, например, в течении в тонком слое жидкости. В теоретической работе [1] было показано существенное отличие этого случая от трехмерной турбулентности: энергия, вносимая в систему на характерном масштабе k_f^{-1} , будет переноситься к более крупным масштабам – из-за нелинейного взаимодействия формируется обратный каскад энергии.

Для неограниченной системы обратный каскад прекращается на масштабе $L_\alpha : \varepsilon^{1/2} \alpha^{-3/2}$, на котором достигается баланс между потоком энергии на единицу массы ε и трением дно с коэффициентом α . В случае ограниченной системы, если её размер L будет меньше L_α , то энергия, переносимая обратным каскадом будет накапливаться вблизи её границы. Это приводит к образованию крупномасштабных когерентных течений с устойчивой во времени скоростью потока.

В работе [2] была представлена аналитическая теория, описывающая изотропный двумерный когерентный вихрь как стационарное течение, подчиняющееся двумерному уравнению Навье–Стокса с линейным трением о дно:

$$\partial_t \mathbf{v} + \alpha \mathbf{v} + (\mathbf{v}, \nabla) \mathbf{v} - \nu \nabla^2 \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \mathbf{f}, \quad (1)$$

где ν – кинематическая вязкость жидкости, ρ – её плотность, а \mathbf{f} – внешняя сила, накачивающая энергию в систему. Такие вихри наблюдались как в численном счете [3, 4], так и в эксперименте [5], где были подтверждены теоретические предсказания для радиальной зависимости средней скорости течения U .

В настоящей работе были рассмотрены осесимметричные возмущения в скорости U изотропного вихря, которые сохраняют свою однородность вдоль линий тока среднего невозмущенного течения U_0 . Они могут возникать как под действием внешней азимутальной силы F , так и из-за малых отклонений в мощности накачки $\varepsilon = \varepsilon_0 + \varepsilon_1(t, r)$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_0$. Было получено линеаризованное уравнение на отклонение в скорости $U_1(t, r) = U - U_0$, $U_1 = U_0$ в координатно-частотном представлении и исследован характер его решений:

$$(-i\omega + \alpha)U_1(\omega, r) + \left(\partial_r + \frac{2}{r}\right) \left(\frac{\varepsilon_0}{\Sigma_0^2(r)} K - \nu\right) r \partial_r \frac{U_1(\omega, r)}{r} = -\left(\partial_r + \frac{2}{r}\right) D \frac{\varepsilon_1(\omega, r)}{\Sigma_0(r)} + F(\omega, r), \quad (2)$$

где $\Sigma_0 = r \partial_r (U_0 / r)$ – локальный сдвиговый параметр течения, а аналитическое выражение для функций $D, K(\omega, r)$ определяется в рамках теоретической модели.

Ответ существенно зависит от доминирующего механизма потерь энергии в сформированном течении вихря. В случае, когда ведущую роль играет вязкая диссипация, было показано, что вклад от взаимодействия с мелкомасштабными флуктуациями течения не влияет качественно на динамику возмущения, которая будет носить диффузионный характер.

В случае преобладания потерь энергии через трение о дно, возмущения имеют волнообразный характер. Была определена область значений (ω, r) , где имеет место распространение данных волн. Найдено, что их закон дисперсии имеет линейный вид со следующим выражением на фазовую скорость:

$$\omega = \nu k, \quad \nu : \sqrt{\alpha \nu k_f^2} r, \quad (3)$$

где коэффициент пропорциональности порядка 1 определяется из статистики накачки системы. При этом длина затухания таких возмущений оказывается много меньше размеров вихря:

$$\frac{1}{\kappa} : \sqrt{\frac{\alpha}{\nu k_f^2}} \frac{r}{\ln(\omega / \nu k_f^2)}. \quad (4)$$

Стоит также отметить, что данная теория указывает на возникновение высокочастотных неустойчивых волновых возмущений на периферии когерентного вихря, чья амплитуда в ходе распространения возрастает. Поскольку подобные возмущения нельзя исключить в описываемой физической системе, это дает новую оценку для характерного размера когерентного вихря $r \leq R^* : (\text{Re} \ln \text{Re})^{3/8} \nu^{1/2} \alpha^{-1/2}$, где $\text{Re} = \varepsilon^{1/3} \nu^{-1} k_f^{-4/3} ? 1$ – значение числа Рейнольдса для течения в малых турбулентных пульсациях, через которые энергия поступает в систему.

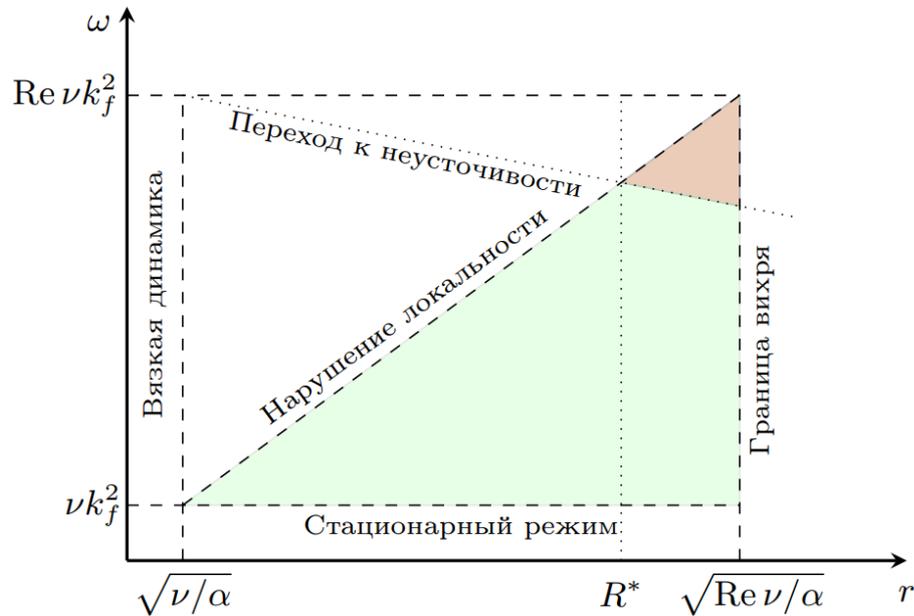


Рис. 1. Схематический график, построенный в логарифмическом масштабе осей, зависимости области частот возмущения ω от расстояния r до центра когерентного вихря, где они реализуются. Зеленым цветом отмечена зона распространения волнообразных возмущений. В зоне, выделенной красным цветом, их динамика приобретает неустойчивый характер

Литература

1. Kraichnan R.H. Inertial ranges in two-dimensional turbulence // Phys. Fluids 10, 1417–1423 (1967).
2. Kolokolov I. and Lebedev V. Structure of coherent vortices generated by the inverse cascade of two-dimensional turbulence in a finite box // Phys. Rev. E 93, 033104 (2016).
3. Laurie J., Boffetta G., Falkovich G., Kolokolov I., and Lebedev V. Universal profile of the vortex condensate in two-dimensional turbulence // Phys. Rev. Lett. 113, 254503 (2014).
4. Doludenko A., Fortova S., Kolokolov I., and Lebedev V. Coherent vortex in a spatially restricted two-dimensional turbulent flow in absence of bottom friction // Phys. Fluids 33, 011704 (2021).
5. Orlov A.V., Brazhnikov M.Y., and Levchenko A.A. Large-scale coherent vortex formation in two-dimensional turbulence // JETP Lett. 107, 157–162 (2018).

Секция теоретической физики

УДК 530.145

Рождение частиц в игрушечной $O(N)$ модели

Д.А. Трунин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Институт теоретической и экспериментальной физики (НИЦ «Курчатовский институт»)

Как правило, рождение частиц в сильных внешних полях рассматривают в квазиклассическом приближении, то есть пренебрегают нелинейностями уравнений движения, которые могут послужить источником больших петлевых поправок [1]. Недавно было показано, что в ряде физически интересных ситуаций – например, в сильных электрических полях [2, 3] или в расширяющейся Вселенной [4, 5] – пренебрегать петлевыми поправками нельзя, поскольку на больших временах они секулярно растут, а пересуммированные вклады в тензор энергии-импульса существенно отличаются от выражений, полученных в квазиклассическом приближении. Источник этого отличия кроется в изменении квантового состояния в результате взаимодействия между частицами, которое квазиклассическое приближение ухватить в принципе неспособно.

Стоит отметить, что для пересуммирования петлевых поправок работы [2–4] полагаются на кинетическое приближение, в котором петлевые поправки к вершинам подавлены по сравнению с петлевыми поправками к пропагаторам (то есть к собственно-энергетической функции). В то же время, в некоторых нестационарных системах – например, легким полям на фоне пространства де Ситтера [6] или ускоренно движущегося зеркала [7, 8] – это приближение применить нельзя. Поэтому до последнего времени учет петлевых поправок в таких системах ограничивался первыми порядками теории возмущений. Такие расчеты всего лишь указывают на неприменимость квазиклассического приближения, однако не позволяют получить корректное выражение.

В этой работе я рассматриваю аналог рождения частиц в игрушечной квантовомеханической модели – квантовом осцилляторе с переменной частотой, квартичным самодействием и $O(N)$ симметрией. Как и для легких полей в де Ситтере и динамическом эффекте Казимира, в этой модели петлевые поправки к вершинам не подавлены по сравнению с поправками к пропагаторам. Используя два разных метода, я вычисляю точные квантовые средние, пропагатор Келдыша и полную энергию возбуждений в пределе больших N . Первый метод полагается на аналог приближения вращающейся волны, которое позволяет пренебречь быстро осциллирующими вкладами в гамильтониан и хорошо работает при небольших отклонениях от стационарности. Второй метод распространяет эти результаты на сколь угодно большие отклонения с помощью диаграммной техники Швингера – Келдыша.

В результате оказывается, что в сильно нестационарных ситуациях, включая резонансные колебания частоты осциллятора, петлевые поправки к древесным выражениям эффективно приводят к дополнительной степени свободы, $N \rightarrow N + 3/2$, которая входит в выражение для средней энергии возбуждений. С одной стороны, простота рассмотренной системы потенциально позволяет экспериментально проверить теоретические предсказания, сделанные с помощью разработанного метода. С другой стороны, этот метод можно легко обобщить на квантовые теории более высокой размерности.

Литература

1. *Birrell N.D., Davies P. C.W.*, Quantum Fields in Curved Space. Cambridge: University Press, 1984.
2. *Akhmedov E.T., Astrakhantsev N., Popov F.K.* Secularly growing loop corrections in strong electric fields // J. High Energy Phys. 09 (2014) 71.
3. *Akhmedov E.T., Popov F.K.* A few more comments on secularly growing loop corrections in strong electric fields // J. High Energy Phys. 09 (2015) 85.
4. *Krotov D., Polyakov A.M.* Infrared Sensitivity of Unstable Vacua // Nucl. Phys. B 849, 410 (2011).
5. *Akhmedov E.T.* Lecture notes on interacting quantum fields in de Sitter space // Int. J. Mod. Phys. D 23, 1430001 (2014).
6. *Akhmedov E.T., Moschella U., Pavlenko K.E., Popov F.K.* Infrared dynamics of massive scalars from the complementary series in de Sitter space // Phys. ReV. D 96, N 2, 025002 (2017)

7. *Akhmedov E.T., Alexeev S.O.* Dynamical Casimir effect and loop corrections // *Phys. ReV. D* 96, N 6, 065001 (2017).
8. *Akopyan L.A., Trunin D.A.* Dynamical Casimir effect in nonlinear vibrating cavities // *Phys. ReV. D* 103, N 6, 065005 (2021).

УДК 530.1

Анализ σ_- когомологий для симметричных полей высших спинов

А.С. Бычков^{1,2}, К.А. Ушаков^{1,2}, М.А. Васильев^{1,2}

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Калибровочная теория высших спинов основана на работах Фронсдала [1] и Фанга и Фронсдала [2], где действие и уравнения движения для безмассовых калибровочных полей любого спина изначально были получены в плоском четырехмерном пространстве Минковского. В пространствах AdS появляется возможность сформулировать непротиворечивую нелинейную теорию полей всех спинов [3, 4].

Построение нелинейной теории высших спинов основано на развернутом подходе [5, 6], который является далеко идущим обобщением картановской формулировки гравитации в терминах дифференциальных форм на поля любых спинов. Процедура развертывания позволяет заменить систему дифференциальных уравнений в частных производных любого порядка на гладком многообразии более крупной системой уравнений первого порядка на векторнозначные дифференциальные формы.

Динамическое содержание теории высших спинов может быть восстановлено из ее развернутой формулировки, используя технику σ_- когомологий [7]. Утверждение, что развернутые уравнения свободных полей высших спинов эквивалентны уравнениям Фронсдала, было сделано в оригинальных работах в спинорном [8] и тензорном [9] формализмах.

В этой статье [10] мы представляем полное доказательство Первой on-shell теоремы путем вычисления колец когомологий оператора σ_- для физически важных случаев симметрических полей целого спина как в плоском пространстве-времени любой размерности, так и в AdS_d , а также для полей любого целого и полужелого спина в AdS_4 . Методика вычислений, аналогичная теории Ходжа для дифференциальных форм, обеспечивает полный анализ динамического содержания свободных развернутых уравнений для симметричных безмассовых полей любого спина. Предоставляя прямое доказательство эквивалентности между формулировкой Фронсдала калибровочной теории высших спинов и ее развернутой формулировкой, эта работа заполняет некоторые пробелы в литературе, а также иллюстрирует общий подход, применимый к широкому классу развернутых систем. Кроме того, в тензорном случае мы вычисляем высшие группы σ_- когомологий и интерпретируем их в терминах высших тождеств Бианки и более общих динамических систем. В частности, мы обсуждаем согласование тождеств Бианки в терминах калибровочных полей один-форм и ноль-форм напряженностей полей.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований.

Литература

1. *Fronsdal C.* Massless Fields with Integer Spin // *Phys. ReV. D.* 1978. V. 18. P. 3624.
2. *Fang, J., Fronsdal, C.* Massless Fields with Half Integral Spin // *Phys. ReV. D.* 1978. V. 18. P. 3630.
3. *Vasiliev M.A.* More on equations of motion for interacting massless fields of all spins in (3+1)-dimensions // *Phys. Lett. B.* 1992. V. 285. P. 225-234.
4. *Vasiliev, M.A.* Nonlinear equations for symmetric massless higher spin fields in (A)dS(d) // *Phys. Lett. B.* 2003. V. 567. P. 139–151.
5. *Vasiliev, M.A.* Equations of Motion of Interacting Massless Fields of All Spins as a Free Differential Algebra // *Phys. Lett. B.* 1988. V. 209. P. 491–497.
6. *Vasiliev, M.A.* Consistent Equations for Interacting Massless Fields of All Spins in the First Order in Curvatures // *Annals Phys.* 1989. V. 190. P. 59–106.
7. *Shaynkman O.V., Vasiliev, M.A.* Scalar field in any dimension from the higher spin gauge theory perspective // *Theor. Math. Phys.* 2000. V. 123. P. 683–700.
8. *Vasiliev, M.A.* Free Massless Fields of Arbitrary Spin in the De Sitter Space and Initial Data for a Higher Spin Superalgebra // *Fortsch. Phys.* 1987. V. 35. P. 741–770.
9. *Lopatin V. E., Vasiliev M.A.* Free Massless Bosonic Fields of Arbitrary Spin in d-dimensional De Sitter Space // *Mod. Phys. Lett. A.* 1988. V. 3. P. 257.
10. *Bychkov A.S., Ushakov K.A., Vasiliev M.A.* The σ_- Cohomology Analysis for Symmetric Higher-Spin Fields // *Symmetry.* 2021. V. 13. P. 1498.

Неабелева фермионная T-дуальность в супергравитации

Л. Н. Астраханцев^{1,2,3}, Э. Т. Мусаев^{2,4}, И. В. Бахматов^{3,4}

¹ Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова НИЦ «Курчатовский институт»

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³ Институт теоретической и математической физики МГУ им. М.В. Ломоносова

⁴ Казанский федеральный университет

Бозонная и фермионная T-дуальности служат одними из механизмов генерации решений в теории супергравитации. В данной работе мы рассмотрели неабелев случай фермионной T-дуальности. Правила преобразования для полей в результате стандартной фермионной T-дуальности требуют антикоммутиации фермионных изометрий, что приводит к комплексификации спиноров Киллинга и к комплекснозначным дуальным фонам.

В нашей работе мы обобщаем преобразования полей на случай, если фермионные изометрии не антикоммутируют. Оказывается, что полученные дуальные фоны являются решениями удвоенной теории поля.

В докладе мы приведем явные примеры неабелевой фермионной T-дуальности на различных начальных фонах. Некоторые из примеров являются бозонными T-дуализированными супергравитационными решениями, в то время как другие фоны даже не являются геометрическими. Данный подход согласован с супергрупповым подходом, основанным на рассмотрении т.н. суперкосетных сигма-моделей.

Литература

1. *Bakhtmatov I. and Berman D.S.* Exploring fermionic T-duality // Nucl. Phys. B832 (2010) 89–108, arXiv:0912.3657[hep-th].
2. *Bakhtmatov I., Colgain E.O., and Yavartanoo H.* Fermionic T-duality in the pp-wave limit // JHEP 10 (2011) 085, arXiv:1109.1052[hep-th].
3. *Borsato R. and Wulff L.* Non-abelian T-duality and Yang-Baxter deformations of Green-Schwarz strings // JHEP 08 (2018) 027, arXiv:1806.04083[hep-th].
4. *Astrakhantsev L., Musaev E., Bakhtmatov I.* Nonabelian fermionic T-duality in supergravity // JHEP 09 (2021) 135, arXiv: 2101.08206 [hep-th].

Инфракрасные петлевые поправки в расширяющейся Вселенной

П.А. Анемподистов^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова

Рассматривается квантовая теория поля в искривленном пространстве-времени, т.е. рассматривается динамика полей материи на фиксированном гравитационном фоне. В данной работе интерес представлял гравитационный фон в виде расширяющегося пространства Минковского, т.е. плоского пространства с конформным фактором, выходящим на различные константы в бесконечном прошлом и бесконечном будущем. На этом фоне была рассмотрена теория действительного скалярного поля с кубическим самодействием, и с помощью нестационарной диаграммной техники были вычислены поправки к заселенностям уровней и аномальным квантовым средним.

Рассмотрение кубического взаимодействия мотивировано тем, что в обычном плоском пространстве закон сохранения 4-импульса зануляет однопетлевую поправку к заселенностям уровней и аномальным квантовым средним в инфракрасном пределе. На фоне же расширяющейся геометрии было получено, что в однопетлевой поправке есть слагаемые, которые не ограничены законом сохранения 4-импульса. Следовательно, было получено, что поправки к заселенностям уровней и аномальным квантовым средним не равны нулю, и более того, являются секулярно растущими. Последний факт позволяет написать кинетическое уравнение на заселенности уровней и аномальные квантовые

средние, и в этом кинетическом уравнении в интеграле столкновений импульсы оказываются не ограниченными законом сохранения 4-импульса.

Литература

1. Bernard C.V., Duncan A. Regularization and renormalization of quantum field theory in curved space-time // Annals of Physics, V. 107. P. 201–221.

УДК 537.1

Узлы в электродинамике

А.Ю. Морозов^{1,2,3}, Н.С. Целоусов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И.Алиханова

³Институт проблем передачи информации им. А. А. Харкевича

Рассматривается специальный класс решений уравнений Максвелла в вакууме, обладающий свойством нулевого поля, т.е. в каждой точке пространства-времени электрические и магнитные поля ортогональны и равны по модулю [1].

В данном классе решений существуют так называемые *узловые решения* уравнений Максвелла. Силовые линии этих решений представляют собой заузленные кривые. Две силовые линии могут быть нетривиально сплетены, друг с другом образуя зацепления.

В данной работе исследовалась временная эволюция узловых силовых линий (см. рис. 1). Силовые линии – это ненаблюдаемый объект, поэтому их эволюция в общем случае может определяться неоднозначно. Было показано, что имеет место самосогласованная эволюция индуцированная вектором Пойтинга-Умнова.

Вектор скорости каждой точки силовой линии в данный момент времени равен вектору Пойтинга в данной точке.

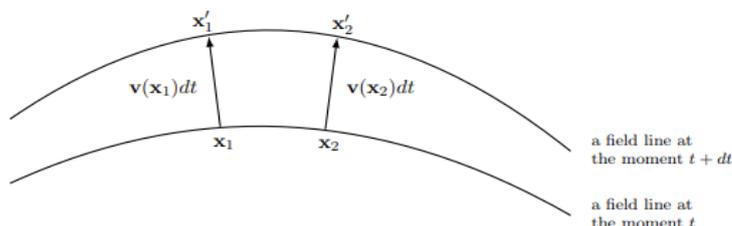


Рис. 1. Эволюция силовых линий

Существуют разные типы силовых линий: замкнутые, незамкнутые, финитные и т.д. Выделенным классом силовых линий являются предельные циклы. Такие силовые линии выделены тем, что являются замкнутыми кривыми в конечном объеме пространства и главное, что их эволюция определяется однозначно. Так оказывается, что эволюция предельных циклов совпадает с эволюцией Пойтинга.

В работе исследовались топологические характеристики предельных циклов. Интересным результатом является доказательство сохранения числа зацепления для любых двух предельных циклов (см. рис. 2).

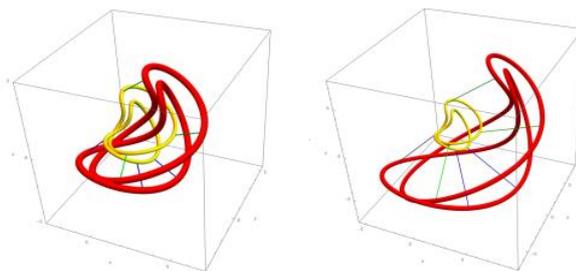


Рис. 2. Эволюция зацепления

Литература

1. Morozov A., Tselousov N. Are Maxwell knots integrable? // Eur. Phys. J. C 80, 1182 (2020).

УДК 532.5.013.12

О бигармонических поправках к уравнению Навье–Стокса

Зо Аунг, С.О. Гладков

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)

Задача, на которой мы хотим сейчас остановиться, относится к общим проблемам классической гидродинамики. Ни в одной из множества монографий, посвященных общим свойствам жидкостей и газов (см. [1–18]), мы не нашли ответа на вопрос о вычислении вклада в правую часть уравнения Навье–Стокса следующих поправок по длине свободного пробега молекул.

Наш интерес к этому вопросу продиктован следующими вполне объективными соображениями. Связаны они с тем, что в последнее время довольно модными объектами исследования стали наночастицы, размер которых лежит в диапазоне $10^{-4} - 10^{-6}$ см. Когда речь заходит о размерах такого порядка, классической формулой Стокса воспользоваться довольно проблематично, поскольку в этом случае длина свободного пробега молекул жидкости (или газа) оказывается сравнимой с диаметром наночастицы.

Для ответа на поставленный вопрос мы воспользуемся хорошо проверенным временем методом кинетического уравнения Больцмана (см., к примеру, [19–21]). Представим классическое уравнение Больцмана в обычном виде [20]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f = L(f), \quad (1)$$

где $f = f(t, \mathbf{p}, \mathbf{r})$ – искомая функция распределения, \mathbf{v} – скорость молекул, $L(f)$ – интеграл столкновений. Будем искать его решение в виде ряда $f = f_0 + f_1 + f_2 + \dots$, где квазиравновесная функция распределения

$$f_0 = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\varepsilon(p) - \mathbf{pV}}{T}}, \quad (2)$$

а нормировочный множитель

$$Z = \int \bar{f} d\Gamma = \int e^{-\frac{\varepsilon(p)}{T}} d\Gamma, \quad (3)$$

здесь $d\Gamma = d^3 p dV$ – элемент фазового объема, равновесная функция распределения $\bar{f} = f_0|_{\mathbf{V}=0}$,

$\varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m}$ – кинетическая энергия молекулы, m – ее масса, а интегрирование ведется по всему импульсному пространству, элемент объема которого есть $d^3 p = dp_x dp_y dp_z$. $dV = dx dy dz$ – элемент объема декартового пространства. Постоянную Больцмана k_B здесь и везде далее будем полагать равной

единице, вектор $\mathbf{V} = \mathbf{V}(t, \mathbf{r})$ представляет собой скорость гидродинамического потока, которым увлекаются молекулы жидкости, функции f_1, f_2, f_3, \dots представляют собой искомые поправки к квазиравновесной функции распределения, и которые нам предстоит найти.

Чтобы решить уравнение (1), представим его правую часть в следующем аддитивном виде:

$$L(f) \approx -\frac{f_0 + f_1 + f_2 + \dots}{\tau_p}, \quad (4)$$

где τ_p – есть время между столкновениями молекул.

Используя принцип баланса мощностей (см. работу [22]), получаем

$$\frac{1}{Z} \int [\varepsilon(p) + T \ln(f_0 + f_1 + f_2 + \dots)] \frac{(f_0 + f_1 + f_2 + \dots)}{\tau_p} d\Gamma + \frac{m}{Z} \int \mathbf{V} \mathbf{V} \bar{f} d\Gamma = 0 \quad (5)$$

Рекуррентную формулу для определения любой поправки n -го порядка к квазиравновесной функции распределения можно представить в виде [22]:

$$f_n = (-1)^n \tau_p^n \left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right]^n f_0 \quad (6)$$

Поэтому приближенно имеем

$$f_1 = -\tau_p (\dot{f}_0 + \mathbf{v} \cdot \nabla f_0), \quad (7)$$

$$f_2 = \tau_p^2 (\ddot{f}_0 + 2\mathbf{v} \cdot \nabla \dot{f}_0 + (\mathbf{v} \cdot \nabla)^2 f_0), \quad (8)$$

где точки над f_0 означают частные производные по времени соответствующего порядка.

После всех разложений получаем

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{\tau_p}{T} \bar{f} \left((\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{V}}) + \mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) \right) \left(1 + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{T} \right) = \\ &= \frac{\tau_p}{T} \bar{f} \left(\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{V}} + (\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{T} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})^2}{T} + \mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Аналогично находим

$$\begin{aligned} f_2 \approx \bar{f} \frac{\tau_p^2}{T} \left[\frac{(\mathbf{p} \cdot \ddot{\mathbf{V}})^2 + 2\mathbf{v} \cdot (\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{V}}) \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + (\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}))^2}{T} - \mathbf{p} \cdot \ddot{\mathbf{V}} - 2\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{V}}) - v_i v_k \frac{\partial^2 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{\partial x_i \partial x_k} - \right. \\ \left. - \left(\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{V}} + 2\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + v_i v_k \frac{\partial^2 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{\partial x_i \partial x_k} \right) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{T} \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

Благодаря уравнению (5) имеем

$$\begin{aligned} \frac{1}{Z} \int \frac{\tau_p \bar{f}}{T} \left\{ \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{V}} + (\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{T} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})(\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{V}})}{T} + \mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + \right. \\ \left. + \tau_p^2 \left[\frac{(\mathbf{p} \cdot \ddot{\mathbf{V}})^2 + 2\mathbf{v} \cdot (\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{V}}) \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + (\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}))^2}{T} - \mathbf{p} \cdot \ddot{\mathbf{V}} - 2\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{V}}) - v_i v_k \frac{\partial^2 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{\partial x_i \partial x_k} - \right. \right. \\ \left. \left. - \left(\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{V}} + 2\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + v_i v_k \frac{\partial^2 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{\partial x_i \partial x_k} \right) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{T} \right] \right\}^2 d\Gamma + \frac{m}{Z} \int \mathbf{V} \mathbf{V} \bar{f} d\Gamma = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

И с точностью до членов порядка V^2 получаем

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{Z} \int \frac{\tau_p \bar{f}}{T} \left\{ (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + (\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{T} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{T} + \mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + \right. \\
& + \tau_p \left[\frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})^2 + 2\mathbf{v} \cdot (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + (\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}))^2}{T} - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) - 2\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) - v_i v_k \frac{\partial^2 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{\partial x_i \partial x_k} - \right. \\
& \left. \left. - \left(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V} + 2\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + v_i v_k \frac{\partial^2 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{\partial x_i \partial x_k} \right) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{T} \right] \right\} d\Gamma + \frac{m}{Z} \int \mathbf{V} \bar{f} d\Gamma = \\
& = \frac{1}{Z} \int \frac{\tau_p \bar{f}}{T} \left\{ (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})^2 + (\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}))^2 + \tau_p^2 \left[(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})^2 + 4(\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}))^2 + \left(v_i v_k \frac{\partial^2 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{\partial x_i \partial x_k} \right)^2 \right] + \right. \\
& + 2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) \left[\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) - \tau_p \left((\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + 2\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + v_i v_k \frac{\partial^2 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{\partial x_i \partial x_k} \right) \right] - \\
& - 2\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) \tau_p \left[(\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + 2\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + v_i v_k \frac{\partial^2 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{\partial x_i \partial x_k} \right] + 2\tau_p^2 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) \left(2\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}) + v_i v_k \frac{\partial^2 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{\partial x_i \partial x_k} \right) + \\
& \left. + 4\tau_p^2 (\mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})) v_i v_k \frac{\partial^2 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{V})}{\partial x_i \partial x_k} \right\} d\Gamma + \frac{m}{Z} \int \mathbf{V} \bar{f} d\Gamma = 0.
\end{aligned}$$

Оставляя здесь только квадратичные по импульсу слагаемые и проводя усреднение по их направлениям, что проще всего сделать в сферической системе координат, находим

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{Z} \int \frac{\tau_p \bar{f}}{T} \left\{ \frac{mT \mathbf{V} \cdot \mathbf{V}}{\tau_p} + \frac{p^2}{3} (\mathbf{V} - \tau_p \mathbf{V})^2 + \frac{p^4}{15m^2} \left[(\operatorname{div} \mathbf{V})^2 + \left(\frac{\partial V_i}{\partial x_k} \right)^2 + \frac{\partial V_i}{\partial x_k} \frac{\partial V_k}{\partial x_i} \right] + \right. \\
& + \frac{4\tau_p^2 p^4}{15m^2} \left[(\operatorname{div} \mathbf{V})^2 + \left(\frac{\partial V_i}{\partial x_k} \right)^2 + \frac{\partial V_i}{\partial x_k} \frac{\partial V_k}{\partial x_i} \right] - \frac{2\tau_p p^4}{15m^2} (\mathbf{V} \cdot \Delta \mathbf{V} + 2\mathbf{V} \cdot \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{V}) - \\
& - \frac{4\tau_p p^4}{15m^2} \left[\operatorname{div} \mathbf{V} \operatorname{div} \mathbf{V} + \frac{\partial V_i}{\partial x_k} \frac{\partial V_i}{\partial x_k} + \frac{\partial V_i}{\partial x_k} \frac{\partial V_k}{\partial x_i} \right] + \frac{2\tau_p^2 p^4}{15m^2} (\mathbf{V} \cdot \Delta \mathbf{V} + 2\mathbf{V} \cdot \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{V}) + \\
& \left. + \frac{4\tau_p^2 p^6}{105m^4} \left(\Delta \mathbf{V} \cdot \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{V} + (\operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{V})^2 + \frac{\partial^2 V_n}{\partial x_i \partial x_k} \cdot \frac{\partial^2 V_k}{\partial x_i \partial x_n} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathbf{V}}{\partial x_i \partial x_k} \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{V}}{\partial x_i \partial x_k} + \frac{1}{4} (\Delta \mathbf{V})^2 \right) \right\} p^2 dp d\Omega = 0,
\end{aligned} \tag{12}$$

где $d\Omega = dx dy dz$ – элемент объема.

После применения к уравнению (12) приема интегрирования по частям, получаем

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{Z} \int \frac{\tau_p \bar{f}}{T} \left\{ \frac{mT \mathbf{V} \mathbf{\mathcal{E}}}{\tau_p} + \frac{p^2}{3} (\mathbf{\mathcal{E}} - \tau_p \mathbf{\mathcal{E}}^2) - \frac{p^4}{15m^2} \mathbf{V} \cdot (\Delta \mathbf{V} + 2 \text{graddiv} \mathbf{V}) - \right. \\
& - \frac{4\tau_p^2 p^4}{15m^2} \mathbf{\mathcal{E}} \cdot (\Delta \mathbf{\mathcal{E}} + 2 \text{graddiv} \mathbf{\mathcal{E}}) + \frac{2\tau_p p^4}{15m^2} \mathbf{V} \cdot (\Delta \mathbf{\mathcal{E}} + 2 \text{graddiv} \mathbf{\mathcal{E}}) + \frac{2\tau_p^2 p^4}{15m^2} \mathbf{V} \cdot (\Delta \mathbf{\mathcal{E}} + 2 \text{graddiv} \mathbf{\mathcal{E}}) + \\
& \left. + \frac{4\tau_p^2 p^6}{35m^4} \mathbf{V} \cdot \left(\Delta \text{graddiv} \mathbf{V} + \frac{1}{4} \Delta^2 \mathbf{V} \right) \right\} p^2 dp d\Omega = 0.
\end{aligned} \tag{13}$$

И окончательно

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{Z} \int \frac{\tau_p \bar{f}}{T} \mathbf{V} \cdot \left\{ \frac{mT \mathbf{V} \mathbf{\mathcal{E}}}{\tau_p} + \frac{p^2}{3} (-\mathbf{\mathcal{E}} + 2\tau_p \mathbf{\mathcal{E}} + \tau_p^2 \mathbf{V}^{(4)}) - \frac{p^4}{15m^2} (\Delta \mathbf{V} + 2 \text{graddiv} \mathbf{V}) + \right. \\
& \left. + \frac{2\tau_p p^4}{15m^2} (\Delta \mathbf{\mathcal{E}} + 2 \text{graddiv} \mathbf{\mathcal{E}}) + \frac{2\tau_p^2 p^4}{5m^2} (\Delta \mathbf{\mathcal{E}} + 2 \text{graddiv} \mathbf{\mathcal{E}}) + \frac{4\tau_p^3 p^6}{35m^4} \left(\Delta \text{graddiv} \mathbf{V} + \frac{1}{4} \Delta^2 \mathbf{V} \right) \right\} p^2 dp d\Omega = 0.
\end{aligned}$$

Полагая здесь выражение в фигурных скобках равным нулю, приходим к обобщенному уравнению Навье–Стокса:

$$\begin{aligned}
& \overline{\mathbf{\mathcal{E}} + \frac{p^2 \tau_p}{3mT} (-\mathbf{\mathcal{E}} + 2\tau_p \mathbf{\mathcal{E}} + \tau_p^2 \mathbf{V}^{(4)}) - \frac{p^4 \tau_p}{15m^3 T} (\Delta \mathbf{V} + 2 \text{graddiv} \mathbf{V}) +} \\
& + \frac{2\tau_p^2 p^4}{15m^3 T} (\Delta \mathbf{\mathcal{E}} + 2 \text{graddiv} \mathbf{\mathcal{E}}) + \frac{2\tau_p^3 p^4}{5m^3 T} (\Delta \mathbf{\mathcal{E}} + 2 \text{graddiv} \mathbf{\mathcal{E}}) + \frac{4\tau_p^3 p^6}{35m^5 T} \left(\Delta \text{graddiv} \mathbf{V} + \frac{1}{4} \Delta^2 \mathbf{V} \right) = 0,
\end{aligned} \tag{14}$$

где черта сверху означает усреднение по импульсам молекул.

Считая жидкость несжимаемой, то есть, полагая $\text{div} \mathbf{V} = 0$ и пренебрегая высшими производными по времени, находим отсюда искомое уравнение

$$\mathbf{\mathcal{E}} = \nu \Delta \mathbf{V} - \nu^2 \tau^* \Delta^2 \mathbf{V}, \tag{15}$$

где кинематическая вязкость ν и время τ^* определены как

$$\begin{aligned}
\nu &= \frac{p^4 \tau_p}{15m^3 T} = \frac{1}{15m^3 T Z_0} \int_0^\infty \tau_p p^6 e^{-\frac{p^2}{2mT}} dp, \\
\nu^2 \tau^* &= \frac{\tau_p^3 p^6}{35m^5 T} = \frac{1}{35m^5 T Z_0} \int_0^\infty \tau_p^3 p^8 e^{-\frac{p^2}{2mT}} dp,
\end{aligned} \tag{16}$$

а новый нормировочный множитель

$$Z_0 = \int_0^\infty p^2 e^{-\frac{p^2}{2mT}} dp. \tag{17}$$

Добавляя в уравнение (15) член с градиентом давления, окончательно приходим к следующему обобщенному уравнению Навье–Стокса

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} = -\frac{\nabla P}{\rho} + \nu \Delta \mathbf{V} - \nu^2 \tau^* \Delta^2 \mathbf{V}. \tag{18}$$

В заключение работы еще раз обратим внимание на два ключевых момента.

- Приведен подробный вывод уравнения Навье–Стокса, в котором учтены следующие поправки по длине свободного пробега молекул, что привело к дополнительному бигармоническому по оператору Лапласа слагаемому в правой части основного уравнения гидродинамики;
- Отмечено, что роль этого слагаемого будет весьма важна в том случае, если мы исследуем свойства наночастиц.

Литература

1. *Прандтль Л., Титъенс О.* Гидро- и аэромеханика. В 2-х т. М. : ГИТТЛ, 1933–1935.
2. *Ламб Г.* Гидродинамика. М.: ГИТТЛ, 1947.
3. *Христианович С.А., Гальперин В.Г., Миллиончиков М.Д., Симонов Л.А.* Прикладная газовая динамика. М. : ЦАГИ, 1948.
4. *Жуковский Н.Е.* Собрание сочинений. Том. 2. Гидродинамика. М. : ГИТТЛ, 1949.
5. *Липман Г.В., Пакет А.Е.* Введение в аэродинамику сжимаемой жидкости. М. : ИЛ, 1949.
6. *Слѣзкин Н.А.* Динамика вязкой несжимаемой жидкости. М. : ГИТТЛ, 1955.
7. *Левич В.Г.* Физико-химическая гидродинамика. М. : Физматгиз, 1959.
8. *Биркгоф Г.* Гидродинамика. Методы. Факты. Подобие. М. : ГИИЛ, 1963.
9. *Серрин Д.* Математические основы классической механики жидкости. М. : ГИИЛ, 1963.
10. *Кочин Н.Е., Кибель И.А., Розе Н.В.* Теоретическая гидромеханика. В 2-х ч. М. : Физматлит, 1963.
11. *Милн-Томсон Л.М.* Теоретическая гидродинамика. М. : Мир, 1964.
12. *Монин А.С., Яглом А.М.* Статистическая гидромеханика. В 2-х ч. М. : Наука, 1965–1967.
13. *Рауз Х.* Механика жидкости. М. : Стройиздат, 1967.
14. *Седов Л.И.* Механика сплошной среды. В 2-х т. М. : Наука, 1970.
15. *Сокольников И.С.* Тензорный анализ. Теория и применения в геометрии и в механике сплошных сред. М.: Наука, 1971.
16. *Ильюшин А.А.* Механика сплошной среды. М. : МГУ, 1971–1990.
17. *Голубева О.В.* Курс механики сплошных сред. М. : Высшая школа, 1972.
18. *Бэтчелор Дж.* Введение в динамику жидкости. М. : Мир, 1973.
19. *Gladkov S.O.* The theory of thermal conductivity and hydrodynamics of Maxwell gas, which is under the influence of an external sound wave. Solid State Communications. 1995. V. 94. N 9. P. 789–791.
20. *Е.М. Лифишиц, Л.П. Питаевский.* Физическая кинетика. Т. 10. М. : Наука. 1979. 528 с.
21. *П. Резибуа, М. Де Лернер.* Классическая кинетическая теория жидкостей и газов. М. : Мир. 1980. 423 с.
22. *Гладков С.О.* Об одном методическом подходе при выводе основных физических уравнений // Физическое образование в вузах. 2021. Т. 27. В. 2. С. 5–12.

УДК 538.9

Топологические квантовые числа для двухэлектронных состояний в кристалле. Применение к триплетному сверхпроводнику UPt_3

Е.А. Тепляков¹, В.Г. Яржемский^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН

Топологические сверхпроводники считаются ключевым направлением в физике конденсированных сред. Одной из центральных проблем в теории топологических сверхпроводников является описание SOP (сверхпроводящего параметра порядка) в рамках квантовой механики, теории групп и топологии. В настоящей работе с использованием анзаца Андерсона [1] для Куперовской пары и метода индуцированных представлений приводится полная теоретико-групповая классификация хиральных состояний для симметрии D_{6h} (точечная группа симметрии топологического сверхпроводника UPt_3). Топологический инвариант-число кручения (winding number) определяется комплексным IR (неприводимым представлением) группы симметрии D_{6h} , структура которой сильно зависит от дополнительных квантовых чисел, которые являются индексами IR подгруппы вращения C_{6h} . Результаты теоретико-группового подхода совпали с результатами топологических методов для групп C_{6h} и D_{6h} [2].

С помощью теоремы Макки-Брэдли [3] и теоремы о транзитивности индуцирования было показано, что дополнительные квантовые числа, а именно индексы неприводимых представлений вращательной подгруппы, определяют угловой момент двухэлектронных состояний для пространственной группы для конечных вращений. Эти дополнительные квантовые числа определяют топологическую структуру и угловой момент куперовских пар.

Во время как нули в базисной плоскости топологически стабильны и определяются основными квантовыми числами, то есть спиновой мультиплетностью и неприводимыми представлениями точечной группы. Дополнительные квантовые числа для Куперовских пар могут быть связаны с экспериментально установленным SOP для топологических фаз UPt_3 . Вертикальные нулевые плоскости

определяются дополнительными квантовыми числами. Узловая структура трех топологических фаз триплетного сверхпроводника UPt_3 определяется в терминах дополнительных квантовых чисел [4].

Литература

1. *Anderson P. W.* Heavy electron superconductors, spin fluctuations, and triplet pairing // *Phys. Rev. B.* 1984. V. 30. P. 1549.
2. *Chen W., Schnyder A.P.* Universality classes of topological phase transitions with higher-order band crossing // *New J. Phys.* 2019. V. 21.
3. *Yarzhemsky V. G., Murav'Ev E.N.* Space group approach to the wavefunction of a Cooper pair // *Journal of Physics: Condensed Matter.* 1992. V. 4, N 13.
4. *Yarzhemsky V. G., Teplyakov E.A.* Additional quantum numbers for two-electron states in solids. Application to topological superconductor UPt_3 . 2021.

УДК 530.1

Когомологии σ_- -комплекса для полей высших спинов в AdS (4)

А.С. Бычков^{1,2}, К.А. Ушаков^{1,2}, М.А. Васильев^{1,2}

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Теория калибровочных полей высших спинов восходит к работам Фронсдала [1] и Фанга и Фронсдала [2], где впервые были получены действие и уравнения движения классических свободных полей произвольного спина в пространстве Минковского. Незадолго до этого были открыты так называемые теоремы запрета [3], из которых следовало существование так называемого $s=2$ -барьера: в пространстве Минковского построение взаимодействующей теории полей всех спинов невозможно. Доказательство теорем запрета существенным образом использует явный вид алгебры изометрий пространства Минковского. Поэтому $s=2$ -барьер, имеющий место в плоском пространстве-времени, может быть преодолен в пространствах постоянной ненулевой секционной кривизны, например, в пространстве анти-де Ситтера AdS_d . Именно в AdS_d появляется возможность сформулировать формально совместную взаимодействующую теорию полей всех спинов [4, 5].

Формулировка нелинейной теории полей всех спинов существенным образом опирается на идею разворачивания [6, 7]. В развернутом подходе путем введения некоторого количества вспомогательных переменных произвольная система уравнений в частных производных на данном многообразии эквивалентным образом переписывается в виде некоторой большей системы уравнений первого порядка, снабженной определенными условиями совместности. Динамический состав теории (то есть, информация о том, какие из переменных отвечают физическим полям, а какие – вспомогательным) при этом восстанавливается по развернутой формулировке посредством вычисления когомологий так называемого σ_- -комплекса [8]. В работе [8] доказывается взаимно-однозначное соответствие между физическими данными теории и классами когомологий этого комплекса. Таким образом, утверждение об эквивалентности исходной формулировки свободной теории высших спинов ее развернутой версии – это в действительности явное перечисление всех когомологий σ_- -комплекса. Это утверждение было сделано в оригинальной работе [9] в спинорном формализме и сейчас известно в литературе под названием «Первая теорема о массовой оболочке».

В этой работе [10] мы представляем полное доказательство Первой теоремы о массовой оболочке путем непосредственного вычисления когомологий σ_- -комплекса для физически значимого случая симметрических полей всех спинов в пространстве AdS_4 . Анализ проведен в формализме производящих функций двухкомпонентных спиноров при помощи техники, аналогичной теории Ходжа для комплексов гладких дифференциальных форм: когомологии интересующего нас комплекса изоморфны как комплексное векторное пространство ядру специально построенного оператора типа Лапласа-Ходжа: $H(\sigma_-) \cong \ker(\Delta)$, где $\Delta = (\sigma_- + \sigma_+)^2$. Поэтому вместо вычисления когомологий оператора σ_- «в лоб» мы строим по нему оператор Δ , вычисляем его ядро и, пользуясь упомянутым выше изоморфизмом, находим таким образом ответ. Эта программа проведена как для бозонных, так и для фермионных полей произвольного спина в пространстве AdS_4 .

Таким образом, в работе [10] мы предьявляем исчерпывающее доказательство Первой теоремы о массовой оболочке для симметричных полей всех спинов в AdS_4 , что заполняет некоторые пробелы

в литературе, а также иллюстрирует силу предложенного метода, применимого для анализа широкого класса развернутых систем.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований.

Литература

1. *Fronsdal C.* Massless Fields with Integer Spin // *Phys. Rev. D.* 1978. V. 18. P. 3624.
2. *Fang, J., Fronsdal, C.* Massless Fields with Half Integral Spin // *Phys. Rev. D.* 1978. V. 18. P. 3630.
3. *Haag R., Lopuszanski J.T., Sohnius M.* All Possible Generators of Supersymmetries of the S-Matrix // *Nucl. Phys. B.* 1975, V. 88. P. 257.
4. *Vasiliev M.A.* More on equations of motion for interacting massless fields of all spins in (3+1)-dimensions // *Phys. Lett. B.* 1992. V. 285. P. 225–234.
5. *Vasiliev, M.A.* Nonlinear equations for symmetric massless higher spin fields in (A)dS(d) // *Phys. Lett. B.* 2003. V. 567. P. 139-151.
6. *Vasiliev, M.A.* Equations of Motion of Interacting Massless Fields of All Spins as a Free Differential Algebra // *Phys. Lett. B.* 1988. V. 209. P. 491–497.
7. *Vasiliev, M.A.* Consistent Equations for Interacting Massless Fields of All Spins in the First Order in Curvatures // *Annals Phys.* 1989. V. 190. P. 59–106.
8. *Shaynkman O.V., Vasiliev, M.A.* Scalar field in any dimension from the higher spin gauge theory perspective // *Theor. Math. Phys.* 2000. V. 123. P. 683–700.
9. *Vasiliev, M.A.* Free Massless Fields of Arbitrary Spin in the De Sitter Space and Initial Data for a Higher Spin Superalgebra // *Fortsch. Phys.* 1987. V. 35. P. 741–770.
10. *Bychkov A.S., Ushakov K.A., Vasiliev M.A.* The σ -Cohomology Analysis for Symmetric Higher-Spin Fields // *Symmetry.* 2021. V. 13. P. 1498.

УДК 514.84

Связь операторов разрезания-склейки и операторов Казимира

А.А. Жабин^{1,2}, А.Д. Миронов^{2,3,4}, А.Ю. Морозов^{1,2,4}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова НИЦ
«Курчатовский институт»

³Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

⁴Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича РАН

Обыкновенные числа Гурвица, впервые появившиеся в литературе более ста лет назад, являются хорошо изученным комбинаторным объектом и перечисляют разветвленные накрытия Римановой сферы. Производящие функции чисел Гурвица являются статсуммами различных топологических теорий. Один из естественных подходов к изучению таких теорий использует операторы разрезания-склейки [1], которые получили свое название благодаря геометрическому определению чисел Гурвица. Эти операторы можно определить как

$$W_{\Delta} S_R(p) = \phi_R(\Delta) S_R(p),$$

где индексы Δ и R обозначают диаграммы Юнга, $S_R(p)$ обозначает полином Шура, а $\phi_R(\Delta)$ – нормированный характер симметрической группы.

Мы изучаем операторы разрезания-склейки для спиновых чисел Гурвица. Спиновые числа Гурвица отличаются от обыкновенных тем, что перечисляют разветвленные накрытия со спиновой структурой. Тем не менее, операторы разрезания-склейки по-прежнему можно определить похожим образом, заменив полиномы Шура на Q -полиномы Шура, а характеры симметрической группы на характеры группы Сергеева [2]:

$$W_{\Delta} Q_R(p) = \Phi_R(\Delta) Q_R(p).$$

Такое определение позволяет получить явное выражение для произвольного спинового W -оператора. Это возможно благодаря связи между спиновыми W -операторами и специально выбранными операторами Казимира, которая позволяет выражать одни операторы через другие. Выбранные операторы Казимира являются нулевыми модами алгебры $W_{1+\infty}^B$ – алгебры симметрий интегрируемой

иерархии БКП. Этот факт, в свою очередь позволяет явно и алгоритмично вычислять операторы Казимира через бозон-фермионное соответствие. Итоговый результат [3], выражающий спиновые операторы через операторы Казимира задается формулой

$$W_{\Delta} = 2 \sum_{\mu \in \Delta} 2^{-|\mu|} Q_{\mu}^*(p_k = C_k) \frac{\Psi_{\mu}(\Delta)}{z_{\Delta}},$$

где C_k обозначают упомянутые операторы Казимира, которые надо подставить в сдвинутый Q-полином Шура Q_{μ}^* вместо переменных p_k . Оставшийся коэффициент $\Psi_{\mu}(\Delta)/z_{\Delta}$ пропорционален характерам неприводимых представлений группы Сергеева. Наконец, сумма берется по всем диаграммам Юнга такого же размера, как и Δ .

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 20-71-10073)

Литература

1. *Mironov A.D., Morozov, A.Yu., Natanzon, S.M.* Complete set of cut-and-join operators in the Hurwitz-Kontsevich theory // *Theor. Math. Phys.* 2011, V. 166(1), P. 1–22.
2. *Mironov A.D., Morozov, A.Yu., Natanzon, S.M., Orlov, A.Y.* Around spin Hurwitz numbers // *Lett. Math. Phys.* 2021, V. 111(5), P. 1–39.
3. *Mironov A.D., Morozov, A.Yu., Zhabin, A.A.* Connection between cut-and-join and Casimir operators // *Phys. Lett. B*, V. 822, P. 1–12.

УДК 539.12

Уравнение состояния кварковой материи при конечных температуре и плотности кварков в рамках модели Намбу–Иона-Лазинио

В.В. Корниенко¹ Ю.Л. Калиновский² А.В. Фризен²

¹Университет Дубна, Дубна, Россия

²Объединенный Институт Ядерных Исследований, Дубна, Россия

Эксперименты по столкновению тяжелых ионов являются источником информации о свойствах материи в условиях высоких температур и плотностей. Предполагается, что при достаточно высоких энергиях температура и плотность вещества достают значений, достаточных для перехода материи из адронной фазы в состояние кварк-глюонной плазмы. Так, моделирование на решетке предсказывает температуру фазового перехода при нулевом кварковом химическом потенциале $T_c \approx 0,154(9)$ ГэВ [1].

С точки зрения теории, взаимодействие между кварками и глюонами описывается лагранжианом квантовой хромодинамики, использование которого напрямую представляется все еще сложным, что приводит к необходимости использования эффективных моделей или расчетов на решетке (решеточной КХД).

В данной работе проводится исследование кварковой материи в рамках эффективной модели Намбу–Иона-Лазинио (НИЛ) с двумя ароматами кварков с лагранжианом [2, 3]:

$$L_{NJL} = \bar{q} \left(i\gamma_{\mu} \partial^{\mu} - \hat{m}_0 - \gamma_0 \mu \right) q + G_s \left((\bar{q}q)^2 + (\bar{q}i\gamma_5 \vec{\tau}q)^2 \right),$$

где q, \bar{q} – кварковые поля, G_s – константа взаимодействия, $\vec{\tau}$ – матрицы Паули в пространстве ароматов, \hat{m}_0 – диагональная матрица токовых масс кварков, μ – кварковый химический потенциал. Используя процедуру Хаббарда–Стратоновича из лагранжиана модели можно получить большой термодинамический потенциал в приближении среднего поля, откуда получается уравнение щели, определяющее массу кварка:

$$m = m_0 - 2G_s \langle q\bar{q} \rangle,$$

где $\langle q\bar{q} \rangle$ – кварковый конденсат. В этой модели конституентная масса кварка возникает вследствие движения токового кварка в скалярном поле через присоединение кваркового конденсата. Модель НИЛ – одна из немногих моделей, позволяющая описать свойства ядерной материи при конечных температуре и кварковом химическом потенциале.

В работе обсуждаются свободные параметры модели: m_0 – токовая масса кварка, G_s константа связи, Λ – параметр обрезания, возникающий в связи с неперенормируемостью модели. Эти параметры фиксируются таким образом, чтобы воспроизвести массу пиона и константу слабого распада пиона в вакууме. Так же в этой работе обсуждается зависимость уравнения состояния кварковой материи от параметров модели. Изучаются фазовые переходы из адронной фазы в КГП и строится фазовая диаграмма на плоскости температура-кварковый химический потенциал. Приводится сравнение с результатами решеточной КХД.

Литература

1. *Bazavov A. et al. (HotQCD Collaboration) «Chiral and deconfinement aspects of the QCD transition» Phys. ReV. D 85, 054503 (2012).*
2. *Калиновский Ю.Л., Тонев В.Д., Фризен А.Ф., «Фазовая диаграмма барионной материи в SU(2) – модели Намбу–Иона-Лазинио с петлей полякова», УФН, 2016, Т. 186, № 4, 387–403.*
3. *Zhuang P., Hufner J., Klevansky S. P., «Thermodynamics of quark-meson plasma in the Nambu-Jona-Lasinio model,» Nucl. Phys., Ser. A 576, 525–552 (1994).*

УДК 530.145.81

Обобщение цифрового представления непрерывных наблюдаемых в квантовой механике на случай произвольной системы счисления

М.Г. Иванов, А.Ю. Полушкин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Ранее в были рассмотрены двоичное (с цифрами $\{0, 1\}$ [1] и $\left\{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\}$ [2, 3]) и троичное (с цифрами $\{0, 1, 2\}$ и $\{-1, 0, 1\}$) [2, 3] разложения координаты и импульса в квантовой механике, а также двоичное разложение на сдвинутой решётке для произвольных цифр $\{d_1, d_1 + 1\}$ [4, 5]. В данной работе производится окончательное обобщение построенного формализма на случай q -ричного разложения координаты и импульса.

В роли цифр выступают эрмитовы операторы с собственными значениями $\{d_1, d_1 + 1, \dots, d_1 + q - 1\}$. Как и ранее, для операторов цифр импульса построено разложение по координатным сдвигам, для операторов цифр координаты – по импульсным сдвигам, что соответствует разложению Фурье. Результаты данной работы объединяют результаты предыдущих работ.

Пусть координатная и импульсная решётки содержат $N = q^n$ узлов, шаг по координате составляет $\Delta x = q^{-n_-}$. Оператор импульса определим как генератор координатных сдвигов: $\hat{T}_\Lambda = e^{2\pi i \Lambda \hat{p}}$. Пусть $n_- = n - n_+$. В таком случае шаг импульсной решётки равен $\Delta p = q^{-n_+}$, так как импульсная решётка является обратной к координатной.

Координату в таком случае будем представлять в виде ряда по степеням основания системы счисления q :

$$\hat{x} = \sum_{s=-n_-}^{n_+-1} d(s, \hat{x}) q^s \pmod{q^{n_+}}. \quad (1)$$

Здесь и далее применяются обозначения $d(s, \hat{x})$ – оператор цифры координаты номер s и $d(r, \hat{p})$ – оператор цифры импульса номер r .

Рассмотрим «наименьшее» число в нашей системе счисления:

$$d_1 \dots d_1, d_1 \dots d_1 = \sum_{s=-n_-}^{n_+-1} d_1 q^s \pmod{q^{n_+}} = -d_1 \Delta x. \quad (2)$$

Таким образом, для рассматриваемой системы счисления положение «нулевого» узла решётки оказывается смещено относительно нуля координаты на величину $-d_1 \Delta x$. Прямым вычислением мы получили явное выражение для оператора цифры импульса номер r :

$$d(r, \hat{p}) = \frac{qd_1 + (q-1)}{2} \hat{1} - \Delta p q^{-r} \sum_{D \in \mathbb{Z}} \sum_{\substack{\sigma=0 \\ \Delta p}}^{q-1} \hat{T}_{-A} \frac{\exp(-2\pi i \Delta p A d_1)}{1 - \exp(2\pi i \Delta p A)}, \quad A = q^{-r} \left(D + \frac{\sigma}{q} \right). \quad (3)$$

Из формулы (3) можно заметить, что граничные условия, накладываемые на операторы координаты и импульса на решётке не всегда оказываются периодическими. Граничные условия оказываются периодическими для координат только в случае $d_1 \in \mathbb{Z}$ для импульса, и наоборот. В общем случае имеют место условия

$$\psi(x + 2^n) = e^{-2\pi i d_1} \psi(x). \quad (4)$$

Интересно отметить связь между «стандартной» системой с цифрами $\{0, 1, \dots, q-1\}$ [5] и произвольной системой, рассмотренной нами выше:

$$d(s, x)_{d_1} = \frac{qd_1}{2} + d(s, x + d_1 \Delta x)_0. \quad (5)$$

График цифры в произвольной системе сдвинут на d_1 по оси ординат и на $-d_1 \Delta x$ по оси абсцисс.

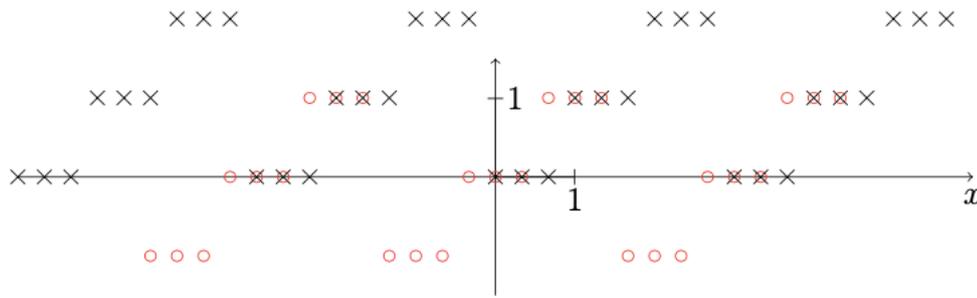


Рис. 1. График значения троичной ($q=3$) цифры номер $s=0$ на конечной решётке для троичных систем с $d_1=0$ (черные кресты) и $d_1=-1$ (красные окружности)

Для произвольной системы счисления коммутационное соотношение между цифрой координаты и цифрой импульса мы получили выражение, похожее на то, которое мы видели для двоичных [1] и троичных [2] систем:

$$[d(s, \hat{x}), d(r, \hat{p})] = -\Delta p q^{-r} \sum_{D \in \mathbb{Z}} \sum_{\substack{\sigma=0 \\ \Delta p}}^{q-1} \left(\frac{d(s, \hat{x}) - d(s, \hat{x} - q^{-r} (D + \frac{\sigma}{q}))}{1 - \exp(2\pi i \Delta p A)} \right) \hat{T}_{-A} \exp(-2\pi i \Delta p A d_1). \quad (6)$$

Данное выражение приводит к уже известному нам правилу: младшая цифра импульса не коммутирует со старшей цифрой координаты, младшая цифра координаты не коммутирует со старшей цифрой импульса, а условия на коммутацию дробных частей координаты и импульса имеет вид $s + r \leq -2$.

Предельный переход на прямую по координате и импульсу заключается в стремлении n_-, n_+ к бесконечности. Как и в случае двоичной [1] и троичной [3] систем счисления, нам понадобится дополнительная перенормировка для получения канонических коммутационных соотношений координата–импульс, а также в некоторых случаях перенормировка для формулы (1).

Литература

1. Иванов М.Г. «Двоичное представление координаты и импульса в квантовой механике» // Теоретическая и Математическая физика, 196(1), 70–87 (2018).
2. Иванов М.Г., Полушкин А.Ю. «Троичное представление координаты и импульса в квантовой механике» // Труды 62-й Всероссийской научной конференции МФТИ, Фундаментальная и прикладная физика, 99–100, (2019).
3. Ivanov M.G, Polushkin A.Y. «Ternary and Binary Representation of Coordinate and Momentum in Quantum Mechanics» // AIP Conference Proceedings, V. 2363, 040002 (2021).
4. Иванов М.Г., Полушкин А.Ю. «Нестандартные двоичные представления координаты и импульса в квантовой механике» // Труды 63-й Всероссийской научной конференции МФТИ, Фундаментальная и прикладная физика, 323–325, (2020).

5. Полушкин А.Ю. «Двоичные и троичные представления координаты и импульса в квантовой механике» // Выпускная квалификационная работа бакалавра 03.03.01, МФТИ, 2021.

УДК 519.6 539.12

Спектр масс псевдоскалярных мезонов в нелокальной эффективной модели КХД

Э.Ф. Мурзин

Государственный университет «Дубна»

Мезоны являются простейшими связанными состояниями в квантовой хромодинамике. Электрослабые взаимодействия мезонов представляют собой важный инструмент для изучения их структуры и понимания механизма КХД на больших расстояниях. Легкие псевдоскалярные мезоны проявляются на всех этапах столкновения тяжелых ионов, образуясь не только в процессе адронизации, но и являясь результатом конечного распада других адронов, они также могут участвовать в качестве сигнала образования кварк-глюонной плазмы (например, «пик» в отношении K^+/π^+). Не менее важным является и изучение информации об адронах, имеющих в своей структуре более тяжелые кварки (B, D -мезоны), а также их распадах.

В этой работе проводится изучение псевдоскалярных мезонов в рамках нелокальной модели КХД со специальным выбором форм-фактора. Вычисление масс и констант слабого распада для псевдоскалярных мезонов требует решения системы уравнений, включающей уравнение для расчета массы мезона (уравнение Бете–Солпитера), константы слабого взаимодействия и уравнения для определения нормировочного фактора.

Уравнение Бете–Солпитера для псевдоскалярных мезонов имеет вид

$$1 = \frac{D_0}{3\pi^2} \left\{ \left(m_1 m_2 - \frac{P^2}{4} \right) \int \frac{dp}{\pi^2} \varphi^2(p^2) \frac{1}{u_1 u_2} + \int \frac{dp}{\pi^2} \varphi^2(p^2) \frac{p^2}{u_1 u_2} \right\}, \quad (1)$$

где $\varphi(p^2)$ – форм-фактор модели, $u_i = (p + q_i)^2 + m_i^2$, m_1, m_2 – массы кварков, P – полный импульс связанного состояния. Функция $\varphi(p^2)$ может быть выбрана произвольным образом, и в нашей работе мы выбрали $\varphi(p^2) = e^{-p^2/\lambda^2}$.

Рассмотрим уравнение, определяющее константу слабого распада псевдоскалярных мезонов. В нашей модели эта константа определяется диаграммой, представленной на рис. 1.

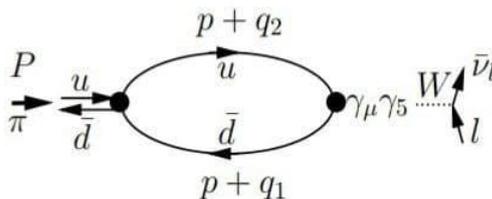


Рис. 1. Диаграмма, определяющая константу лептонного распада $\pi \rightarrow l\nu$. Вершина $i\gamma_5$ – вершина связи пиона с кварк-антикварковой парой. Вершина $\gamma_\mu \gamma_5$ – вершина, связывающая кварк-антикварковую пару со слабым током, имеющим $V - A$ структуру (связь с W – бозоном)

В результате вычислений, получается выражение

$$F_\pi = \frac{N_C N_H}{4\pi^2} \left\{ \frac{m_2 - m_1}{P^2} \int \frac{dp}{\pi^2} \varphi(p^2) \frac{(pP)}{u_1 u_2} + \frac{1}{P^2} (m_2(Pq_1) - m_1(Pq_2)) \int \frac{dp}{\pi^2} \varphi(p^2) \frac{1}{u_1 u_2} \right\}. \quad (2)$$

Для фиксирования нормировочного фактора N_H используется формула

$$\Pi_H(P^2) = \Pi_H(P^2 = -M_H^2) + \frac{\partial \Pi_H}{\partial P^2} \Big|_{P^2 = -M_H^2} (P^2 + M_H^2), \quad (3)$$

где $\Pi_H(P^2)$ – поляризационный оператор связанного состояния, зависящий от полного импульса P , M_H – масса связанного состояния адрона.

Свободными параметрами данной модели являются массы кварков m_u, m_d, m_s, m_c, m_b , параметр λ_H , который описывает эффективный размер мезонов, определяются из уравнений (1) – (3) таким образом, чтобы отфитировать наиболее известные физические величины. При этом поведение λ_H отражает общую физическую картину: геометрический размер мезона (который пропорционален λ_H) уменьшается с увеличением массы мезона.

На основе уравнений (1) – (3) в работе получены массы, константы распада, λ_H и N_H для псевдоскалярных мезонов с кварками u, d, s, c . Полученные результаты сравнивались с результатами других моделей и экспериментальными данными [1].

Литература

1. *Chang Q., Li X-N., Li X-Q., Su F.* Decay constants of pseudoscalar and vector mesons with improved holographic wavefunction // Chinese Physics C. 2018. V. 2.

УДК 51-71

Заметка об особенностях квантовых полей в пространствах с горизонтами

К.В. Базаров^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и экспериментальной физики

Работа посвящена вычислению квантовых средних от тензора энергии импульса скалярного поля. Вычисление таких средних представляет интерес, потому что они используются в квазиклассическом уравнении Эйнштейна, когда гравитация является классической, а поля материи квантовые. В нашей работе мы сконцентрировались на трех пространствах с горизонтами: пространства Риндлера, де Ситтера и Шварцшильда. Причём параметры подобраны так, что канонические температуры всех трёх пространств совпадали. Вычисления проводятся следующим способом: мы рассматриваем стационарное решение классического уравнения Эйнштейна. На фоне этого решения квантуем скалярное поле. Затем считаем среднее соответствующего тензора энергии импульса по тепловой матрицы плотности. А для регуляризации вычтем тоже самое, но при канонической температуре. Опуская детали, приведём кратко результаты вычисления тензора энергии импульса вблизи горизонта трех пространств. Во-первых, регуляризованный тензор энергии импульса равен нулю для канонической температуры. Во-вторых, во всех трех пространствах тензор энергии имеет тензорный вид отличный от тензора энергии импульса идеальной жидкости. А ключевое свойство, что тензор энергии импульса неограниченно растёт при стремлении к горизонту.

Стоит отметить, что квантовые средние имеют схожий вид. Этот факт можно было бы связать с тем, что все три пространства имеют схожую геометрию вблизи горизонта. Однако, на самом деле, при вычислении средних мы учитывали вклады от всех мод, с любой энергией, что вообще говоря учитывает геометрию не только вблизи горизонта.

В заключении хочется подчеркнуть тот факт, что квантовые средние растут вблизи горизонта. Причём этого свойства не было в двух измерениях [1]. И в нашем случае мы не можем пренебрегать обратной реакцией квантовых полей на гравитацию.

Литература

1. *E.T. Akhmedov, P.A. Anempodistov, K.V. Bazarov, D.V. Diakonov, U. Moschella.* Heating up an environment around black holes and inside de Sitter space // Phys. Rev. D, 103(2):025023, 2021. arXiv:2010.10877, doi:10.1103/PhysRevD.103.025023.

От КХД к эффективным теориям: адронизация

Д.Д. Шелковкин¹

Государственный университет «Дубна»

Изучение свойств материи в критических условиях является актуальной задачей современной физики и входит в тематические планы существующих и будущих экспериментов по столкновению тяжелых ионов (НИСА, Дубна). Современные теоретические расчеты связаны с моделированием возможных процессов, происходящих при переходе материи из одного фазового состояния в другое. В связи с этим, становится актуальной задача теоретического описания свойств адронов как составных объектов и их взаимодействий при конечной температуре и плотности. Такие теории основаны на эффективных мотелях КХД.

В первой части работы описан переход от Лагранжиана КХД к эффективным моделям, получен сам Лагранжиан эффективной модели КХД, воспроизводящий основные теоремы киральной алгебры токов. При этом эффективное действие

$$W[q, q^-] = \int d^4x \left\{ q^-(x) [G_0^{-1}(x)] q(x) - \frac{1}{2} \int d^4y j_\mu^a(x) [g^2 \widehat{D}_{\mu\nu}^{ab}(x-y)] j_\nu^b(y) \right\}, \quad (1)$$

с функцией Грина свободных кварков

$$G_0^{-1} = i\delta^\mu \gamma_\mu - \widehat{m}^0 \quad (2)$$

\widehat{m}^0 – массовая матрица $\widehat{m}^0 = \text{diag}(m_1^0, m_2^0, \dots, m_{N_f}^0)$, N_f – число ароматов кварков. Кварковые цветные токи имеют вид

$$j_\mu^a(x) = q^-(x) \left(\frac{\lambda^a}{2} \right) \gamma_\mu q(x) \quad (3)$$

с матрицами Гелл-Манна λ^a цветной группы $SU(3)_c$. Билокальное ядро взаимодействия в (1):

$$\widehat{D}_{\mu\nu}^{ab}(x-y) \equiv \delta^{ab} g_{\mu\nu} D(x-y) \quad (4)$$

будем рассматривать феноменологически как эффективный глюонный пропагатор. Отметим, что такой выбор ядра взаимодействия сохраняет все основные теоремы киральной алгебры токов.

Во второй части работы описан процесс адронизации с помощью преобразования Хаббарда–Стратоновича. Получены уравнения Швингера–Дайсона для описания спектр-масс кварков, образующих связанные состояния:

$$\Sigma(p) = \widehat{m}^0 - i \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} V(p-q) \gamma_\mu S(q) \gamma_\mu \quad (5)$$

где – эффективное ядро взаимодействия, $S^{-1}(q) = q_\mu \gamma_\mu - \Sigma(q)$,

и Бета-Солпитера для вершинной функции

$$\Gamma^{ab}(p|P) = i \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} V(p-q) \gamma_\mu G_a(q + \frac{P}{2}) \Gamma^{ab}(q|P) G_b(p - \frac{P}{2}) \gamma_\mu \quad (6)$$

В результате проделанной работы показано, что полученные лагранжианы воспроизводят теоремы киральной алгебры токов (спонтанное нарушение киральной симметрии и теорема Голдстоуна) и мо-

¹ shdd.19@uni-dubna.ru

гут быть использованы для описания свойств мезонов как при нулевой так и при конечных температурах. В работе обсуждается выбор эффективного ядра взаимодействия и показано, что полученные формулы приводят к моделям Намбу–Иона-Лазинио и различным вариантам нелокальных эффективных моделей КХД. Так же показано, что для тяжелых кваркониев (типа J/ψ) такая формулировка позволяет получить нерелятивистское уравнение Шредингера.

Литература

1. Калиновский Ю.Л., Тонеев В.Д., Фризен А.В. // УФН, 186, 387–403 (2016).
2. Акишин П.Г., Калиновский Ю.Л. Препринт. ОИЯИ, P2-97-404, 1997.

УДК 531.011

Вариационный принцип в динамике развёрнутых уравнений

М.А. Васильев¹ А.А. Тарусов^{1,2}

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рассмотрено расширение «off-shell» системы развёрнутых уравнений [1] за счёт введения вариаций исходных динамических переменных как дополнительных переменных. Гомологическое векторное поле Q (обобщенный гамильтониан), ассоциированное с исходной развернутой системой, расширяется до нового \mathcal{Q} , которое так же нильпотентно. Если в рассмотрении [1] когомологии Q задают возможные действия системы – инвариантные функционалы, то, как показано в этой работе, когомологии \mathcal{Q} задают пары действия с соответствующими ему уравнениями Эйлера–Лагранжа. Полученные уравнения Эйлера–Лагранжа позволяют ограничить развёрнутую систему на массовую оболочку.

Построение оператора \mathcal{Q} позволяет также ввести оператор вариации δ , являющийся дифференциалом де Рама в пространстве-мишени. Показано, что \mathcal{Q} и δ антикоммутируют, что позволяет свести задачу к рассмотрению бикомплекса.

Применение полученной конструкции к известному примеру скалярного поля воспроизводит известные результаты. В контексте перехода к «on-shell» системе, пояснена невозможность формулировки теории высших спинов в пространстве Минковского.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда 18-12-00507.

Литература

1. Vasiliev M.A., Action, Charges and Off-Shell Fields in the Unfolded Dynamics Approach // Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys. 3 (2006), 37–80.

ДК 530.145

Обобщение 2d-гравитации А.М. Полякова на случаи с простейшими неинвариантными состояниями

Д.И. Садеков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В 1980-х годах А.М. Поляков, В.Г. Книжник и А.Б. Замолотчиков разработали модель двумерной квантовой гравитации [1–3]. Отправной точкой была формулировка А.М. Поляковым теории Лиувилля одного скалярного поля как теории 2d-гравитации, индуцированной конформной материей [3]. Последующее развитие теории Полякова–Лиувилля привело к многочисленным результатам, таким как вычисление точных корреляционных функций и приложения к матричным моделям [4–5]. При этом во всех работах рассматривалась КТП в Пуанкаре-инвариантных состояниях. Однако недавно было замечено, что квантовая теория поля в Пуанкаре-неинвариантных состояниях также приводит к новым и интересным явлениям [6–8]. Целью нашей работы является модифицировать теорию 2d-гравитации А.М. Полякова на простейшие случаи неинвариантных состояний материи.

Именно, эффективное действие для поля метрики $g_{\mu\nu}$ определяется как

$$e^{-W_{\text{eff}}[g_{\mu\nu}]} = \int D\Phi e^{-S_{\text{CFT}}[g_{\mu\nu}, \Phi]}$$

для некоторой конформной теории S_{CFT} с полями Φ . В дальнейшем, следуя [1, 2], мы будем работать в калибровке светового конуса:

$$ds^2 = dx^+ dx^- + h_{++} (dx^+)^2.$$

Тогда наша задача сводится к пересуммированию следующего ряда, в котором усреднение по конформной материи производится с нетривиальной матрицей плотности $\widehat{\rho}_0$:

$$e^{-W_{\text{eff}}} = \left\langle e^{-\frac{1}{\pi} \int T_{--} h_{++}} \right\rangle_{\widehat{\rho}_0} = 1 - \frac{1}{\pi} \int h_{++} \langle T_{--} \rangle_{\widehat{\rho}_0} + \frac{1}{2\pi^2} \int h_{++} \langle T_{--} T_{--} \rangle_{\widehat{\rho}_0} h_{++} + \dots,$$

где T_{--} – тензор энергии-импульса конформной теории.

Будет рассмотрено два примера: вставка примарного состояния конформной теории поля с конформной размерностью Δ , а также термальное распределение конформной материи с температурой $T = \frac{1}{\beta}$. В первом случае ответ, записанный в ковариантных терминах, имеет вид

$$W_{\text{eff}} = -\Delta \int d^2x \sqrt{|g|} \frac{1}{\square} (x, 0) R(x) + \frac{d}{96\pi} \int d^2x d^2y \sqrt{|g(x)|} \sqrt{|g(y)|} R(x) \frac{1}{\square} (x, y) R(y),$$

где R – скаляр Риччи, а \square – ковариантный лапласиан. В случае термального распределения эффективное действие для h_{++} дается формулой:

$$W_{\text{eff}} = \frac{1}{24\pi} \int d^2x d^2y \left(\partial_-^2 h_{++}(x) + \frac{2\pi}{\beta} \partial_- h_{++}(x) \right) \left[\frac{1}{\partial_- (\partial_+ - h_{++} \partial_-)} \right]_{\beta} \times \\ \times \left(\partial_-^2 h_{++}(y) + \frac{2\pi}{\beta} \partial_- h_{++}(y) \right),$$

где индекс β обозначает периодические условия для функции Грина.

Таким образом, в работе будут предьявлены простейшие модификации индуцированной гравитации в двух измерениях для случаев с нетривиальными состояниями конформной материи. В дальнейшем планируется изучать модели с более сложными состояниями, например, со вставками потомков примарного поля конформной теории, распределения конформной материи по импульсам и т.п. Отдельный интерес представляет изучение подобных моделей на квантовом уровне, то есть с учетом квантовых флуктуаций поля метрики $g_{\mu\nu}$.

Литература

1. Polyakov A.M. Quantum Gravity in Two-Dimensions // Mod. Phys. Lett. A. 1987.
2. Knizhnik V. G., Polyakov A.M., Zamolodchikov A.B. Fractal Structure of 2D Quantum Gravity // Mod. Phys. Lett. 1988.
3. Polyakov A.M. Quantum geometry of bosonic strings // Physics Letters B. 1981. Zamolodchikov A.B. Three-point function in the minimal Liouville gravity // Theor. Math. Phys. 2005.
4. Belavin A.A. and Zamolodchikov A.B. On Correlation Numbers in 2D Minimal Gravity and Matrix Models // J. Phys. A. 2009.
5. Akhmedov E.T. Curved space equilibration versus flat space thermalization: A short review // Modern Physics Letters A. 2021.

6. Akhmedov E.T., Bazarov K.V., Diakonov D.V. Quantum fields in the future Rindler wedge // Physical Review D. 2021. Akhmedov E.T., Anokhin A.V., Sadekov D.I. Currents of created pairs in strong electric fields // International Journal of Modern Physics A. 2021.

УДК 543.145

Пространственно-подобные инстантоны в голографической КХД

К.И. Измайлов¹, А.С. Горский^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова
НИЦ «Курчатовский институт»

Рассмотрены инстантоны в модели голографической квантовой хромодинамики, получающейся из конфигурации N_c D8-бран, помещённые на гравитационном фоне N_f D4-бран. В данной модели возникает 5-мерный лагранжиан Янга–Миллса, получающийся из DBI-действия для неабелевых калибровочных полей, живущих на D8-бранах. Итоговый лагранжиан модели имеет вид

$$S = S_{YM} + S_{CS} \quad (1)$$

$$S_{YM} = -\kappa \int d^4 x dz \operatorname{tr} \left(\frac{1}{2} h(z) F_{\mu\nu}^2 + k(z) F_{\mu z}^2 \right) \quad (2)$$

$$h(z) = (1 + z^2)^{-\frac{1}{3}}, k(z) = 1 + z^2 \quad (3)$$

$$S_{CS} = \frac{N_c}{24\pi^2} \int \omega_5^{U(N_f)}(A) \quad (4)$$

$$\omega_5^{U(N_f)}(A) = \operatorname{tr} \left(AF^2 - \frac{i}{2} A^3 F - \frac{1}{10} A^5 \right), A = A_\mu dx^\mu + A_z dz \quad (5)$$

здесь $\kappa = \frac{\lambda N_c}{216\pi^3}$, λ – константа связи т’Хоофта, N_c – количество D8-бран.

При разложении по константе связи $\frac{1}{\lambda}$ в ведущем порядке по теории возмущений удаётся найти статическое решение, являющееся BPST-инстантоном с фиксированным размером ρ_{inst} :

$$\rho_{inst} = \frac{1}{8\pi^2\lambda} \sqrt{6/5}. \quad (6)$$

Исследуются свойства протяжённого в пространстве инстантона, получающегося из исходного BPST-инстантона $A(x_1, x_2, x_3, z)$ заменой зависимости от одной из пространственных координат на зависимость от времени $A(x_1, x_2, t, z)$. Рассматривается конфигурация из двух параллельных протяжённых инстантонов (т.е. имеющая барионный заряд равный 2), вычисляется энергия их взаимодействия как функция от их размера и расстояния между ними и прочие свойства.

Литература

1. Sakai S., Sugimoto S., Low Energy Hadron Physics in Holographic QCD // Prog. Theor. Phys. 113, 843 (2005) [hep-th/0412141].
2. Gorsky A.S., Grekov A., Flavored extended instanton in QCD // arXiv:1910.06304 (2019).

Идентификация дискретных уравнений Пенлеве

Е.С. Трунина^{1,2}¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)²Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

Дискретные уравнения Пенлеве часто возникают в теории случайных матриц и ортогональных полиномов. Одним из таких примеров является недавняя статья [1]. В статье [1] при рассмотрении Гауссова унитарного ансамбля со скачком возникает следующая система рекуррентных соотношений для ортогональных полиномов:

$$\begin{cases} \bar{x} + x = (t - \frac{1}{2}y)y, \\ x^2 = \frac{1}{2}(n+x)y\underline{y}, \end{cases}$$

где, $x := x_n$, $\bar{x} := x_{n+1}$, $y := y_n$, $\underline{y} := y_{n-1}$ и. В 2001 году Хидетака Сакай предложил геометрическую классификацию дискретных уравнений Пенлеве, основанную на симметриях поверхности начальных условий [2]. В данной классификации каждое семейство уравнений характеризуется двумя аффинными группами Вейля. Мы показали, что система, полученная в [1], является дискретным уравнением Пенлеве типа Канонический вид этого уравнения согласно [3]:

$$\begin{cases} \bar{f} + f = g - c - \frac{a_2}{g}, \\ \underline{g} + g = f + c + \frac{a_1}{f}, \end{cases} \quad (A_2^{(1)} / E_6^{(1)})$$

где для параметров выполняются условия: $\bar{a}_1 = a_1 - 1$, $\bar{a}_2 = a_2 + 1$, $a_0 + a_1 + a_2 = 1$.

Кроме того, мы получили точный вид замены координат и параметров, приводящий систему к каноническому виду:

$$\begin{cases} f(x, y) = \sqrt{2} \frac{x}{y} \\ g(x, y) = \frac{y^2 + 2x - 2ty}{\sqrt{2}y} \end{cases} \quad \begin{cases} a_1 = -n \\ a_2 = n + 1 \\ c = -\sqrt{2}t \end{cases} \quad \begin{cases} x(f, g) = f(g - f - c) \\ y(f, g) = \sqrt{2}(g - f - c) \end{cases}$$

Полученные результаты в дальнейшем планируется использовать для нахождения более глубокой связи между теорией ортогональных полиномов и дискретными уравнениями Пенлеве.

Литература

1. *Min C., Chen Y.* Painleve transcendents and the Hankel determinants generated by a discontinuous Gaussian weight // *Math. Meth. Appl. Sci*42 (2019), 515–556.
2. *Sakai H.* Rational surfaces associated with affine root systems and geometry of the Painleve equations // *Comm. Math. Phys.* 220 (2001), N 1, 165–229.
3. *Kajiwara K., Noumi M., Yamada Y.* Geometric aspects of Painleve equations // *J. Phys. A*50 (2017), N 7, 073001, 164.

Свободные фоковские парафермионы в модели сильной связи с диссипацией

А.С. Мастюкова^{1,2}, Д.В. Курлов¹, В. Грицев^{1,3}, А.К. Фёдоров^{1,2}

¹Российский квантовый центр

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Университет Амстердама, Институт теоретической физики

Фундаментальный интерес и, одновременно с этим, важность потенциальных приложений ставит анализ квантовых систем, содержащих экзотические квазичастичные возбуждения, на передний план современных физических исследований. С этой точки зрения анионы – это частицы с очень богатой обменной статистикой, которые существуют в пространствах с размерностью не равной 4 – привлекают большое внимание [1]. Возможные применения неабелевых анионов в основном связаны с их использованием для топологически защищенной обработки квантовой информации [2]. Однако поиск экспериментальной реализации подобных экзотических квазичастиц является крайне нетривиальной задачей. Значительный интерес также представляют фоковские парафермионы – частицы, которые обобщают комплексные бесспиновые фермионы и по своей природе являются взаимодействующими квазичастицами. Простейшей системой для реализации фоковских парафермионов является одномерная (1D) модель сильной связи, которая, однако, является взаимодействующей и неинтегрируемой [3]. Было предпринято много попыток разработать модели со свободными (невзаимодействующими) парафермионами, но существующие предложения требуют нефизичных условий, таких как реализация чисто неэрмитовых систем. В данной работе мы представляем способ реализации свободных фоковских парафермионов в модели сильной связи с контролируемой диссипацией простой формы. Интересно, что введение диссипации преобразует изначально неинтегрируемую модель в точно решаемую.

Введем операторы рождения и уничтожения для фоковских парафермионов. Тогда получим

$$(F_j^\dagger)^m |0\rangle = |m_j\rangle, \quad 0 \leq m \leq n-1, \quad (1)$$

где $|0\rangle$ – это вакуум, а $|m_j\rangle$ – это состояние Фока с m Фоковскими парафермионами на j -м узле цепочки (одномерной квантовой системы, представляющей собой набор из узлов и взаимосвязей между ними). Иными словами, в одном состоянии может находиться до $n-1$ идентичных фоковских парафермионов. Для многочастичного фоковского состояния действие операторов рождения и уничтожения сложнее:

$$\begin{aligned} F_j^\dagger |\dots, m_j, \dots\rangle &= \omega^{-\sum_{k=1}^{j-1} m_k} |\dots, m_j + 1, \dots\rangle, \\ F_j |\dots, m_j, \dots\rangle &= \omega^{\sum_{k=1}^{j-1} m_k} |\dots, m_j - 1, \dots\rangle, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\omega = e^{2\pi i/n}$. Операторы рождения и уничтожения фоковских парафермионов удовлетворяют следующим соотношениям:

$$(F_j^\dagger)^n = F_j^n = 0, \quad (F_j^\dagger)^m F_j^m + F_j^{n-m} (F_j^\dagger)^{n-m} = 1, \quad (3)$$

где $1 \leq m \leq n-1$. Непосредственным следствием уравнения (3) является $F_j^m (F_j^\dagger)^m F_j^m = F_j^m$. А для операторов, действующих на разных узлах решетки, мы имеем

$$F_j F_k = \omega^{\text{sgn}(k-j)} F_k F_j, \quad F_j^\dagger F_k = \omega^{-\text{sgn}(k-j)} F_k F_j^\dagger. \quad (4)$$

Видно, что для случая $n=2$ формулы (3) и (4) сводятся к стандартным соотношениям для идентичных фермионов.

Мы рассматриваем модель сильной связи для Фоковских парафермионов на цепочке из L узлов с открытыми граничными условиями. Гамильтониан такой системы имеет следующую форму:

$$H = - \sum_{m=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{L-1} \left(\alpha_m (F_j^\dagger)^m F_{j+1}^m + \text{H.c.} \right) - \sum_{m=1}^{n-1} \mu_m \sum_{j=1}^L (F_j^\dagger)^m F_j^m, \quad (5)$$

где α_m – m -частичная амплитуда перескока, а μ_m – химический потенциал, зависящий от количества фоковских парафермионов на узле. Гамильтониан (5) не является интегрируемым и не описывает свободные частицы [3].

Предположим теперь, что система (4) не является полностью изолированной, а связана с марковской диссипативной средой. В этом случае система описывается с помощью уравнения Линдблада, которое мы запишем как

$$\partial_t \rho = -i \left(H_{\text{eff}} \rho - \rho H_{\text{eff}}^\dagger \right) + \sum_{j,m} \gamma_m L_j^{(m)} \rho L_j^{(m)\dagger} \equiv \mathcal{L} \rho, \quad (6)$$

где ρ – матрица плотности, \mathcal{L} – супероператор Лиувилля, а $L_{j,q}$ – оператор квантового скачка (Лидблада), действующий на j -ом узле. Эффективный неэрмитовый гамильтониан имеет вид

$$H_{\text{eff}} = H - i \sum_{j,m} \frac{\gamma_m}{2} L_j^{(m)\dagger} L_j^{(m)}. \quad (7)$$

Наша задача – показать, что при выборе диссипации определенного вида, модель (5) становится свободной. Рассмотрим операторы перескока следующего вида:

$$L_j^{(m)} = F_j^m + \Delta_m F_{j+1}^m, \quad 1 \leq m \leq n-1, \quad (7)$$

где $\Delta_m \neq 0$ – комплексный параметр. Тогда эффективный гамильтониан принимает вид

$$H_{\text{eff}} = - \sum_{m=1}^{n-1} \left\{ i \gamma_m \Delta_m \sum_{j=1}^{L-1} (F_j^\dagger)^m F_{j+1}^m + i \frac{\gamma_m}{2} \sum_{j=1}^{L-1} \left((F_j^\dagger)^m F_j^m + |\Delta_m|^2 (F_{j+1}^\dagger)^m F_{j+1}^m \right) + \mu_m \sum_{j=1}^L (F_j^\dagger)^m F_j^m \right\}.$$

Его спектр легко получить: $H_{\text{eff}} |m_1, \dots, m_L\rangle = E_{m_1, \dots, m_L} |m_1, \dots, m_L\rangle$. Собственные значения зада-

$$E_{m_1, \dots, m_L} \equiv E_m = - \sum_{j=1}^L \sum_{p=1}^{m_j} \left(\mu_p + \frac{i}{2} \Gamma_j^{(p)} \right), \quad \text{где}$$

ются формулой:

$$\Gamma_1^{(p)} = \gamma_p, \Gamma_L^{(p)} = \gamma_p |\Delta_p|^2, \Gamma_j^{(p)} = \Gamma_1^{(p)} + \Gamma_L^{(p)}, 2 \leq j \leq L-1.$$

Используя результат работы [4], можно показать, что спектр неэрмитового гамильтониана E_m позволяет получить *точный* спектр для полного Лиувиллиана \mathcal{L} :

$$\lambda_{m,p} = -i (E_m - E_p^*), \quad (8)$$

где $E_m = E_{m_1, \dots, m_L}$. Аналогичным образом можно построить точные собственные матрицы Лиувиллиана из собственных векторов H_{eff} . Таким образом, мы показали, что модель сильной связи (5) с диссипацией вида (8) описывает свободные фоковские парафермионы.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-42-05002, а также поддержана Российской Дорожной картой развития высокотехнологичной области «Квантовые вычисления».

Литература

1. Bogoliubov N.M., Bullough R.K., A q-deformed completely integrable Bose gas model // J. Phys. A: Math. Gen. 1992. V. 25. P. 4057.
2. Nayak C., Simon S.H., Stern A., Freedman M., Das Sarma S., Non-Abelian anyons and topological quantum computation // ReV. Mod. Phys. 2008. V. 80. P. 1083.
3. Rossini D., Carrega M., Calvanese-Strinati M., and Mazza L., Anyonic tight-binding models of parafermions and of fractionalized fermions // Phys. Re. B 2019. V. 99. P. 085113.
4. Torres J.M., Closed-form solution of Lindblad master equations without gain // Phys. ReV. A 2014. V. 89. P. 052133.

Топологические солитоны в скалярных теориях с полиномиальным самодействием*А.А. Мальнев¹, Т. В. Гани², П. А. Блинов¹*¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)²Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Рассмотрена теоретико-полевая модель с одним действительным скалярным полем $\varphi = \varphi(x, t)$ в 1+1 измерениях, заданная лагранжианом:

$$L = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 - V(\varphi) \quad (1)$$

с потенциалом

$$V(\varphi) = \frac{1}{2} (1 + \varphi)^{2m} (1 - \varphi)^{2n}, \quad m, n \in \mathbf{N}^+. \quad (2)$$

В статическом случае $\varphi = \varphi(x)$ и уравнение движения может быть сведено к ОДУ 1-го порядка:

$$\frac{d\varphi}{dx} = \sqrt{2V}. \quad (3)$$

Получено решение типа топологического солитона [1, 2], соединяющего вакуумы модели $\varphi = \pm 1$. Для этого потенциала мы нашли топологический солитон в неявном виде (см. рис. 1):

$$x - x_0 = -\frac{1}{(1 - \varphi)^{n-1}} \sum_{j=1}^{m-1} \frac{C_{m+n-2}^{j-1}}{2^j (m-j) C_{m-1}^{j-1}} \cdot \frac{1}{(1 + \varphi)^{m-j}} + \frac{C_{m+n-2}^{m-1}}{2^{m-1}} \sum_{s=1}^{n-1} \frac{1}{2^s (n-s)} \cdot \frac{1}{(1 - \varphi)^{n-s}} + \frac{C_{m+n-2}^{m-1}}{2^{m+n-1}} \ln \frac{1 + \varphi}{1 - \varphi} \quad (4)$$

Найдены степенные асимптотики [3, 4] солитонного решения:

$$\varphi_s(x) \approx \begin{cases} -1 + \frac{[2^n (m-1)]^{1/(1-m)}}{|x|^{1/(m-1)}} & , \text{ при } x \rightarrow -\infty \\ 1 - \frac{A^{1/(n-1)}}{x^{1/(n-1)}} & , \text{ при } x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad \text{где } A = \frac{1}{2^m} \left[\frac{C_{m+n-2}^{m-1}}{n-1} - \sum_{j=1}^{m-1} \frac{C_{m+n-2}^{j-1}}{(m-j) C_{m-1}^{j-1}} \right], \quad (5)$$

а также энергия покоя (масса):

$$M_s = \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^n \frac{[(-1)^j + (-1)^k] C_m^j C_n^k}{j+k+1}. \quad (6)$$

Спектр возбуждений топологического солитона в линейном приближении определяется из задачи Штурма–Лиувилля – стационарного уравнения Шредингера:

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \eta(x) = \omega^2 \eta(x) \quad (7)$$

с потенциалом

$$U(x) = \frac{d^2 V}{d\varphi^2} \Big|_{\varphi_s(x)}. \quad (8)$$

В случае солитона, заданного неявно в виде $x = x_s(\varphi)$, потенциал может быть получен лишь в параметрическом виде, а именно

$$U(x): \quad \begin{cases} U(\varphi) = \frac{d^2 V}{d\varphi^2}, \\ x(\varphi) = x_s(\varphi). \end{cases} \quad (9)$$

Можно показать, что в дискретном спектре всегда есть нулевой уровень $\omega_0 = 0$ (трансляционная мода). Соответствующая собственная функция может быть получена в параметрическом виде:

$$\eta_0(x): \begin{cases} \eta_0(\varphi) = \frac{1}{x_s'(\varphi)}, \\ x(\varphi) = x_s(\varphi). \end{cases} \quad (10)$$

В случае солитона со степенной асимптотикой нулевой уровень расположен на границе непрерывного спектра. При этом волновая функция нулевой моды убывает степенным образом при $x \rightarrow \pm\infty$. В дискретном спектре возбуждений солитона нет других уровней, кроме нулевого.

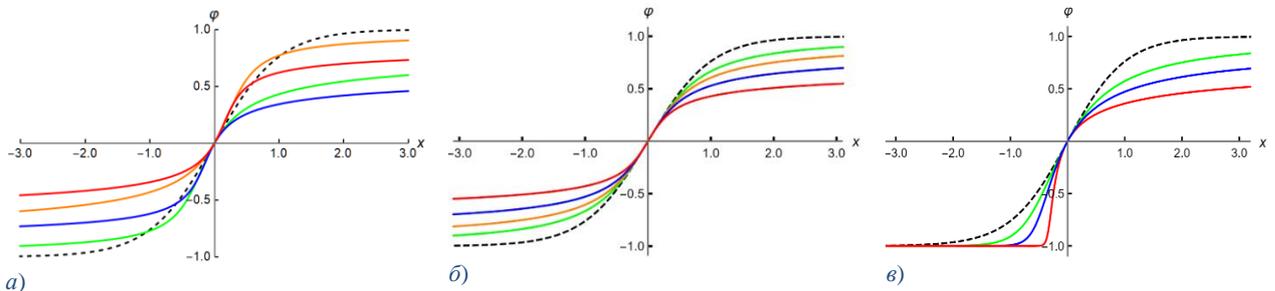


Рис. 1. Разные случаи топологических солитонов (штриховой линией на всех графиках показан солитон модели φ^4 , соответствующий $m=n=1$): а) в правой части рисунка сплошные кривые соответствуют (сверху вниз) случаям $\{m=5, n=3\}$, $\{m=10, n=7\}$, $\{m=3, n=5\}$, $\{m=7, n=10\}$. б) частный случай $m=n$ – в порядке удаления от штриховой кривой идут $n=2, 3, 5, 10$. в) частный случай $m=1$ – в порядке удаления от штриховой кривой идут $n=2, 3, 5$

С другой стороны, при $m \geq 2, n \geq 2$ потенциал является вулканоподобным, см. рис. 2, а спектр задачи Штурма–Лиувилля может содержать в себе квазинормальные моды. Отметим также, что в случае степенных асимптотик солитона всегда $U(x) \rightarrow 0+0$, $U(x) \sim 1/x^2$ при $x \rightarrow \pm\infty$.

При столкновении солитонов, имеющих степенные асимптотики, ранее наблюдались резонансные явления [5, 6]. Однако теория, их объясняющая, пока не построена. Изучение спектра задачи (7) может помочь продвинуться в этом направлении.

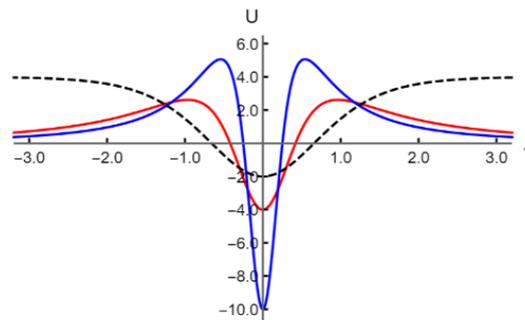


Рис. 2. «Квантовомеханический» потенциал (9); штриховая линия соответствует кинку модели φ^4 (потенциал Пешля-Теллера), вулканоподобные кривые соответствуют $m=n=2$ (более мелкая яма) и $m=n=5$ (более глубокая яма)

Литература

1. *Shnir Y.M.* Topological and Non-Topological Solitons in Scalar Field Theories. Cambridge U.K.: Cambridge University Press, 2018.
2. *Manton N., Sutcliffe P.* Topological Solitons. Cambridge U.K.: Cambridge University Press, 2004.
3. *Christov I.C. et al.* Long-range interactions of kinks // Phys. ReV. D. 2019. V. 99. P. 016010.
4. *Blinov P. A., Gani T.V., Gani V. A.* Domain wall thickness and deformations of the field model // J. Phys.: Conf. Ser. 2020. V. 1690. P. 012085.
5. *Belendryasova E., Gani V. A.* Scattering of the φ^8 kinks with power-law asymptotics // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 2019. V. 67. P. 414.
6. *Christov I.C. et al.* Kink-antikink collisions and multi-bounce resonance windows in higher-order field theories // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 2021. V. 97. P. 105748.

Амплитуда распределения лидирующего твиста дважды тяжелого бариона и ее первый обратный момент

А.К. Шухтина

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Дважды тяжелые барионы представляют собой сильно связанные системы, состоящие из двух тяжелых c - или b -кварков и одного легкого u -, d - или s -кварка. Они обозначаются в соответствии с их изоспином и составом тяжелых кварков. Дважды тяжелые барионы с изоспином $1/2$ называются Ξ_{cc} (ccq), Ξ_{bc} (bcq) и Ξ_{bb} (bbq), где $q = u, d$, в то время как странные дважды тяжелые барионы, Ω_{cc} (ccs), Ω_{cb} (cbs) и Ω_{bb} (bbs), не имеют изоспина. Дважды тяжелые барионы были предметом интенсивных поисков долгое время, вплоть до 2017 года, когда один из них, Ξ_{cc}^{++} (ccu), был обнаружен коллаборацией LHCb в распаде $\Xi_{cc}^{++} \rightarrow \Lambda_c^+ K^+ \pi^+$ и подтвержден в канале $\Xi_{cc}^{++} \rightarrow \Xi_c^+ \pi^+$ [1, 2]. Его экспериментально измеренные масса и ширина распада составляют $M(\Xi_{cc}^{++}) = (3621,6 \pm 0,4) \text{ МэВ}$ и $\Gamma(\Xi_{cc}^{++}) = (2,56 \pm 0,27) \times 10^{-13} \text{ с}$ [3].

Теоретически дважды тяжелый барион по динамике аналогичен тяжелому мезону. Динамика обоих определяется тем, что легкий кварк находится во внешнем цветовом поле тяжелого антикварка в тяжелом мезоне или дважды тяжелого дикварка в дважды тяжелом барионе. Предполагая, что тяжелые составляющие обоих адронов являются точечными статическими источниками, можно обобщить подход светового конуса к волновой функции тяжелого мезона [4] на волновую функцию дважды тяжелого бариона. Свяжем начало системы отсчета с этими тяжелыми составляющими адронов и введем световой конус. В этом случае можно определить два изотропных вектора $n_{\pm}^{\mu} = (1, 0, 0, \pm 1)/\sqrt{2}$, для которых $n_{\pm}^2 = 0$ и $(n_+ \cdot n_-) = 1$, так что произвольный 4-вектор имеет следующее разложение: $V^{\mu} = V_+ n_+^{\mu} + V_- n_-^{\mu} + V_{\perp}^{\mu}$, где $V_{\pm} = n_{\pm}^{\mu} V_{\mu}$. В этом подходе антикварк или дважды тяжелый дикварк соединены с легким кварком линией Вильсона $E(0, z)$, которая принимает значение $E(0, z) = 1$ в калибровке Фока-Швингера глюонного поля, $A_+(z) = 0$.

Рассмотрим B -мезон, как пример тяжелого мезона, и сопоставим ему дважды тяжелый барион Ξ_{bc} . Для Ω_{bc} -бариона следует учесть массу s -кварка, однако массовые поправки здесь обсуждаться не будут. Матричный элемент локального аксиально-векторного тока B -мезона равен $\langle 0 | b(0) \gamma^{\mu} \gamma_5 q(0) | B(v) \rangle = i f_B v^{\mu}$, где $q(x)$ и $b(x)$ – поля легкого и тяжелого кварков, v^{μ} – 4-скорость B -мезона в нерелятивистском пределе, и $f_B \approx 190 \text{ МэВ}$ – константа распада B -мезона. Общая структура локального Ξ_{bc} -барионного тока следующая: $J_{\Xi_{bc}}(x) = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} [b(x)^{\alpha T} C \gamma_5 c(x)^{\beta}] \Gamma q(x)^{\gamma}$, где α, β и γ являются цветовыми индексами, $\Gamma = \{I, \gamma_5, \gamma_{\mu}, \gamma_{\mu} \gamma_5, \sigma_{\mu\nu} = i[\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}]/2\}$, и C – матрица зарядового сопряжения. Матричный элемент перехода из состояния Ξ_{bc} с $J^P = 1/2^+$ в вакуумное можно записать как $\langle 0 | J_{\Xi_{bc}}(0) | \Xi_{bc}(v) \rangle = i f_{\Xi_{bc}} U(v)$, где $U(v)$ – биспинор бариона со спином $1/2$. Для бариона со спин-четностью $J^P = 3/2^+$ $U(v)$ следует заменить вектор-спинором $U^{\mu}(v)$.

Матричный элемент нелокального барионного тока может быть получен аналогично тому, как это делается для B -мезона [4]. В тяжелом мезоне антикварк Q^* имеет бесконечно большую массу и, следовательно, статичен, в то время как легкий кварк $q(z)$ находится на расстоянии z от него ($z^2 = 0$) и определяет динамику мезона. В рассматриваемом барионе легкий кварк находится на расстоянии z от центра дважды тяжелого дикварка и нелокальные операторы бариона можно записать как $O_0(t) = d(0) E(0, z) q(z)$ и $O_1^{\mu}(t) = \varepsilon^{\mu}(0) E(0, z) q(z)$, где $t = (v z)$ и $d(0)$ и $\varepsilon^{\mu}(0)$ – операторы покоящегося дважды тяжелого дикварка QQ' со спином $S = 0$ и $S = 1$ соответственно. Будем далее предполагать, что у Ξ_{bc} -бариона дикварк не имеет спина, векторный дикварк здесь не рассматривается. Как было показано в [4], наличие симметрии тяжелого кварка в тяжелом мезоне уменьшает число амплитуд распределения на световом конусе с трех до двух. По аналогии, с учетом этой симметрии, матричные элементы перехода из Ξ_{bc} -барионного состояния в вакуумное также определяются двумя амплитудами распределения $\varphi_+(t)$ и $\varphi(t)$. В общем случае, дважды тяжелые дикварки следует рассматривать как состояния, образованные двумя тяжелыми кварками, которые пространственно разнесены на расстояние R , однако при построении правил сумм КХД следует использовать нелокальные токи, в которых оба тяжелых кварка находятся в одной и той же точке пространства-времени. Это означает, что дикварк следует рассматривать как локальный объект.

В правилах сумм КХД начинают со среднего по вакууму от произведения двух или более токов и в зависимости от вычисляемой величины, это могут быть как локальные, так и нелокальные интерполяционные токи Ξ_{bc} -бариона: процедура преобразования этого матричного элемента в правила сумм

КХД такая же, как и для B -мезона [4]. Прделав соответствующие выкладки, можно получить следующие правила сумм для амплитуды распределения ведущего твиста $\varphi_+(\omega)$, полученной из $\varphi_+(t)$ преобразованием Фурье:

$$f_{\Xi_{bc}}^2 \varphi_+(\omega) = \frac{3\omega}{8\pi^2\tau} e^{(\bar{\Lambda}-\omega/2)/\tau} [1 - e^{-(\varepsilon_c-\omega/2)/\tau}] - \frac{\langle\bar{q}q\rangle}{8\tau} \tilde{f}_s\left(\frac{\omega}{2\tau}\right) e^{(\bar{\Lambda}-\omega/2)/\tau}, \quad (1)$$

где $\bar{\Lambda} = M_{\Xi_{bc}} - m_b - m_c$ – эффективная масса бариона, m_b и m_c – массы b - и c -кварков, $\langle\bar{q}q\rangle$ – локальный конденсат легких кварков, τ – борелевский параметр, ε_c – эффективный порог правил сумм КХД. Функция $\tilde{f}_s(v)$, характеризующая нелокальный кварковый конденсат, связана с пространственной функцией $f_s(x^2)$ соотношением: $f_s(x^2) = \int dv \tilde{f}_s(v) e^{vx^2}$ и для нее предложено две модели: $\tilde{f}_s^I(v) = \delta(v - m_0^2/4)$ [5] и $\tilde{f}_s^{II}(v) = \lambda^{p-2} v^{1-p} e^{-\lambda/v} / \Gamma(p-2)$ [6], где $m_0^2 = \langle\bar{q}Gq\rangle/\langle\bar{q}q\rangle$ – отношение кварк-глюонного конденсата к кварковому, $p = 3 + 4\lambda/m_0^2$, и λ – свободный параметр.

Как и в случае тяжелых мезонов, первый обратный момент амплитуды распределения лидирующего твиста [4, 7]: $\lambda_{\Xi_{bc}}^{-1} = \int_0^\infty d\omega \varphi_+(\omega)/\omega$, представляет интерес в физических приложениях, где задействован дважды тяжелый барион. Чтобы получить эти правила сумм, необходимо проинтегрировать правила сумм, полученные для $\varphi^+(\omega)$, с весовым коэффициентом $1/\omega$. Такие правила сумм для $B_{(s)}$ -мезона представлены в [7]. Аналогичная аналитическая форма этих правил сумм, полученных для Ξ_{bc} -бариона в ведущем по α_{st} порядке для нелокального кваркового конденсата второго типа, имеет вид:

$$\lambda_{\Xi_{bc}}^{-1} = \frac{e^{\bar{\Lambda}\tau}}{4\pi^2 f_{\Xi_{bc}}^2} \left[1 - \frac{\pi^2 \langle\bar{q}q\rangle}{\tau \Gamma(p-2)} \lambda^{\frac{p-3}{2}} K_{p-1}(2\sqrt{\lambda}) \right], \quad (2)$$

где $K_\nu(z)$ – модифицированная функция Бесселя. Можно также получить поправки, обусловленные массой s -кварки, если применить анализ, использованный для B_s -мезона [7], к странному Ω_{bc} -бариону. Детали расчетов и результаты будут представлены в готовящейся статье.

Обсуждаются амплитуды распределения дважды тяжелых барионов, определенные на световом конусе, с учетом симметрии тяжелых кварков. Динамически эти амплитуды аналогичны тем, что вводятся в тяжелом мезоне, поскольку и те, и другие определяются движением одного легкого кварка относительно статического силового центра. Как следствие, в дважды тяжелом барионе в рассматриваемом приближении существует две амплитуды распределения, из которых $\varphi_+(\omega)$ – амплитуда лидирующего твиста. Обсуждаются построение правил сумм КХД для вычисления ее первого обратного момента.

Литература

1. Aaij R. et al. Observation of the doubly charmed baryon Ξ_{cc}^{++} // Phys. ReV. Lett. 2017. V. 119. P. 112001.
2. Aaij R. et al. Observation of the doubly charmed baryon $\Xi_{cc}^{++} \rightarrow \Xi_c^+ \pi^+$ // Phys. ReV. Lett. 2018. V. 121. P. 162002.
3. Zyla P. A. et al. The Review of Particle Physics // Prog. Theor. Exp. Phys. 2020. V. 2020. P. 083C01.
4. Grozin A., Neubert M. Asymptotics of heavy meson form-factors // Phys. ReV. D. 1997. V. 55. P. 272.
5. Mikhailov S.V., Radyushkin A.V. The pion wave-function and QCD sum rules with nonlocal condensates // Phys. ReV. D. 1992. V. 45. P. 1754.
6. Braun V., Gornicki P., Mankiewicz L. Ioffe-time distributions instead of parton momentum distributions in description of deep inelastic scattering // Phys. ReV. D. 1995. V. 51. P. 6036.
7. Khodjamirian A., Mandal R., Mannel T. Inverse moment of the B_s -meson distribution amplitude from QCD sum rule // JHEP. 2020. V. 10. P. 043.

УДК 53.01

Экзотические потенциалы и тождества Бьянки в $SL(5)$ исключительной теории поля

К.А. Губарев^{1,2}, Э.Т. Мусаев^{1,3}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова НИЦ «Курчатовский институт»

³ Казанский федеральный университет «Институт физики»

11-мерная супергравитация обладает скрытыми группами симметрии – группами U-дуальности. Исключительные теории поля позволяют сформулировать 11-мерную супергравитацию в явно

ковариантном виде относительно U-дуальности. В представленной работе мы используем $SL(5)$ исключительную теорию поля [1]. Полями такой теории являются обобщенные реперы и обобщенные калибровочные поля, для которых можно построить обобщенные потоки (обобщенные тензоры напряженности). В терминах таких потоков, являющихся аналогом коэффициентов неголономии, может быть сформулирована теория. Эти потоки должны удовлетворять некоторым тождествам Бьянки, их источниками являются экзотические браны.

В представленной работе построены тождества Бьянки для потоков $SL(5)$ исключительной теории поля. Для этого были использованы методы, развитые при построении тождеств Бьянки для $O(d,d)$ двойной теории поля, позволяющей описывать 10-мерную супергравитацию в виде, явно ковариантном относительно группы T-дуальности [2, 3]. А именно, часть тождеств Бьянки может быть найдена из требования ковариантности потоков относительно обобщенных диффеоморфизмов, другая же часть может быть записана как сумма с неопределенными коэффициентами производных обобщенных потоков и квадратичных по потокам вкладов, пропорциональных условию на тензор погружения в калиброванную супергравитацию [4]. Неопределенные коэффициенты находятся из явной проверки тождеств.

Для $O(d,d)$ двойной теории поля известно, что источники в тождествах Бьянки соответствуют различным способам вложения экзотических бран в расширенное пространство, а также что по этим тождествам можно построить дуальные экзотические потенциалы, взаимодействующие электрическим образом с экзотическими бранами [5]. В работе обсуждается обобщение этих результатов на 11-мерный случай.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-72-10144.

Литература

1. *Musaev E.T.* Exceptional field theory $SL(5)$ // JHEP. 2016. V. 02. P. 012.
2. *Geissbuhler D., Marques D., Nunez C., Penas V.* Exploring Double Field Theory // JHEP. 2013. V. 06. P. 101.
3. *Musaev E.T.* Gauge Field Fluxes and Bianchi Identities in Extended Field Theories // Theor. Math. Phys. 2019. V. 200. P. 1158–1170.
4. *Le Diffon A., Samtleben H.* Supergravities without an Action: Gauging the Trombone // Nucl. Phys. B. 2009. V. 200. P. 1–35.
5. *Blair C., Musaev E.T.* Five-brane actions in double field theory // JHEP. 2018. V. 03. P. 111.

УДК 530.145, 539.1.01

Низкоэнергетическое эффективное действие $N=4$ суперсимметричной теории Янга–Миллса в бигармоническом подходе: члены высших порядков

В. А. Ивановский

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Институт теоретической и математической физики, МГУ им. М.В. Ломоносова

$N=4$ суперсимметричная теория Янга–Миллса (SYM) в четырёх измерениях проявляет много интересных свойств как на классическом, так и на квантовом уровне. А именно, это наиболее симметричная теоретикополевая модель в физике известная на сегодняшний день. Данная модель калибровочно инвариантна имеет максимальное возможное число суперсимметрий и обладает конформной симметрией. На квантовом уровне модель УФ конечна и её бета-функция равна нулю для всех петель. Её квантовое эффективное действие может быть сопоставлено с действием D3-браны в теории суперструн, и тем самым в рамках 4D, $N=4$ SYM теории открывается возможность изучения низкоэнергетических эффектов теории струн методами квантовой теории поля [1].

Для изучения структуры эффективного действия удобно использовать суперпространственные подходы, в которых часть или все суперсимметрии реализованы явно, что сильно упрощает построение суперсимметрично инвариантных выражений [2]. Так как для $N=4$ SYM теории суперполевой формализм, в котором все суперсимметрии представлены явно и вне массовой поверхности не существует, было придумано много разных подходов с меньшим числом явных суперсимметрий.

Для решения задачи о построении суперинвариантов в 4D, $N=4$ теории Янга–Миллса был применен ранее разработанный метод бигармонического суперпространства [3]. Достоинством данного метода является то, что он обеспечивает простой переход от $N=4$ суперполей к гармоническим $N=2$ суперполям, удовлетворяющим уравнениям движения, что позволяет строить новые $N=4$

суперинварианты. Существенным моментом развитого подхода является применение тождеств Бьянки в бигармоническом суперпространстве для построения $N=4$ суперсимметрично инвариантных функционалов в $4D$, $N=4$ теории Янга–Миллса.

В данной работе с помощью бигармонического подхода были проанализированы поправки в однопетлевое эффективное действие $N=4$ SYM теории с 4, 6 и 8 производными. На основании анализа получены следующие результаты:

- Обнаружено, что все $N=4$ суперинварианты с 4 производными совпадают с известным лидирующим вкладом в эффективное действие [4];
- Показано, что не существует $N=4$ суперсимметрично инвариантного выражения с 6 производными. Этот факт объясняет отсутствие данной поправки в однопетлевом эффективном действии.
- Было построено общее $N=4$ суперсимметрично инвариантное выражение с 8 производными. Также было показано, что неоднозначность в поправке в эффективное действие с 8 производными, связанная с использованием постоянного фонового поля в статье [5], может быть фиксирована на основе R -симметрии. То есть требованием, чтобы данная поправка была инварианта не только относительно суперсимметрии, но и R -симметрии.

Литература

1. *Maldacena J. M.*, The large N limit of superconformal field theories and supergravity, *Int. J. Theor. Phys.* 38 (1999) 1113 [*Adv. Theor. Math. Phys.* 2 (1998) 231].
2. *Galperin A.S., Ivanov E.A., Ogievetsky V. I., Sokatchev E.S.* Harmonic superspace // Cambridge, UK: UniV. Pr. (2001).
3. *Buchbinder, I.L., Ivanov, E.A., Ivanovskiy, V. A.* New bi-harmonic superspace formulation of $4D$, $N = 4$ SYM theory. *J. High Energ. Phys.* 2021, 10 (2021).
4. *Buchbinder I. L., Ivanov E.A., Samsonov I.B.* The Low-Energy $N=4$ SYM Effective Action in Diverse Harmonic Superspaces // *Phys. Part. Nucl.* 48 (3) (2017) 333.
5. *Banin A.T., Buchbinder I.L., Pletnev N.G.* One loop effective action for $N=4$ SYM theory in the hypermultiplet sector: Leading low-energy approximation and beyond, *Phys. ReV. D* 68 (2003) 065024.

УДК 530.145, 539.1.01

Пролегомены ко всякой $N=2$ суперсимметричной теории Васильева

Н.М. Заиграев

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Объединённый институт ядерных исследований

При изучении суперсимметричных теорий важную роль играет понятие суперпространства. В суперпространстве, которое является естественным обобщением пространства Минковского, можно реализовать симметрии теории off-shell что значительно упрощает процедуру построения суперсимметричных действий и инвариантов. В теориях с расширенной суперсимметрией фундаментальную роль играет гармоническое суперпространство [1], в котором имеется аналитическое подпространство, являющееся аналогом кирального суперпространства в минимальной $D=4$ суперсимметрии. Гармоническое суперпространство определяется как факторпространство расширенной $N=2$ суперсимметричной группы Пуанкаре:

$$HR^{4+2|8} = \frac{\{L, P, Q, su(2)\}}{\{L, u(1)\}} = \{x, \theta, u\}$$

Формулировать $N=2$ суперсимметричные теории высших спинов естественно в гармоническом суперпространстве, что и было сделано в работе [2], обзору результатов и следствий которой посвящается эта работа. Конструкция, использованная для построения калибровочно-инвариантных теорий высших спинов является обобщением построения $N=2$ линеаризованной супергравитации [3, 4, 5].

В теории гравитации фундаментальным объектом является метрика и группа диффеоморфизмов псевдориманова многообразия. В теории супергравитации на полевом уровне помимо метрики появляется набор суперпартнёров, и вместо метрики фундаментальным объектом является набор препотенциалов, на которые не наложены связи, а диффеоморфизмы расширяются до супердиффеоморфизмов искривленного аналитического подпространства. Препотенциалы появляются как вейлбейны в гармонической производной. В голономном базисе она принимает вид

$$D^{++} = \partial^{++} + H^{++m} \partial_m + H^{++\mu-} \partial_\mu^+ + H^{++\mu+} \partial_\mu^- + H^{++5} \partial_5$$

На препотенциалы действует группа диффеоморфизмов аналитического подпространства, которая содержит в себе диффеоморфизмы и локальные преобразования суперсимметрии. Используя эту симметрию можно выбрать калибровку и отождествить поля из суперполя с физическими полями. В калибровке Весса-Зумино их компонентный состав соответствует off-shell мультиплету N=2 супергравитации. Например, векторный потенциал принимает вид и описывает гравитон, пару гравитинов:

$$H_{WZ}^{++m} = (\theta^+)^{2\mu\nu} e_{\mu\nu}^m + (\theta^+)^3 \psi^{\mu m i} + (\theta^+)^4 V^{m(ij)} u_i^+ u_j^+$$

Обобщение на случай высших спинов достигается путём добавления дополнительных спинорных индексов к нетривиальной части гармонической производной и рассмотрения соответствующих этой модификации преобразований. При этом, в отличие от супергравитации, отсутствует геометрическая интерпретация преобразований. Мультиплет со старшим спином s содержит on-shell спины $(s, s-1/2, s-1/2, s-1)$ и off-shell описывается в терминах двух бозонных аналитических суперполей и двух фермионных аналитических суперполей. Из этих суперполей было построено N=2 суперсимметричное, калибровочно-инвариантное действие, на компонентном уровне сводящееся к действию Фронсдала в бозонном секторе и действию Фанга-Фронсдала в фермионном [2]. Также были построены взаимодействия этого мультиплета с мультиплетами материи.

Таким образом, гармоническое суперпространство открывает целый ряд возможностей для работы с N=2 суперсимметричной теорией высших спинов и обсуждению целого круга новых задач связывающих теорию высших спинов [6] и теорию расширенной суперсимметрий, чему и посвящена моя статья. Основной акцент будет поставлен на обсуждении результатов работы [2].

Литература

1. Galperin A.S., Ivanov E.A., Ogievetsky V. I., Sokatchev E.S. Harmonic superspace // Cambridge, UK: UniV. Pr. (2001)
2. Buchbinder I., Ivanov E., Zaigraev N., Unconstrained off-shell superfield formulation of 4D, N=2 supersymmetric higher spins // [arXiv:2109.07639 [hep-th]]
3. Galperin A.S., Nguyen Anh Ky., Sokatchev E. N=2 Supergravity in Superspace: Solution to the Constraints // Class.Quant.GraV. 4 (1987) 1235.
4. Galperin A.S., Ivanov E.A., Ogievetsky V. I., Sokatchev E. N=2 Supergravity in Superspace: Different Versions and Matter Couplings // Class.Quant.GraV. 4 (1987) 1255.
5. Zupnik B.M. Background harmonic superfields in N=2 supergravity // Theor.Math.Phys. 116 (1998) 964-977, Teor.Mat.Fiz. 116 (1998) 288-304.
6. Vasiliev M.A., Higher spin gauge theories in four-dimensions, three-dimensions, and two-dimensions, Int. J. Mod. Phys. D 5 (1996), 763-797

Секция физики высоких плотностей энергии

УДК 533.922

Горение в сверхзвуковом потоке с использованием пилона, оборудованного плазменным актуатором

Н.С. Колосов, А.А. Фирсов

Объединённый институт высоких температур РАН

Плазменно-стимулированное горение топлива в сверхзвуковом потоке представляет собой надежный подход к воспламенению и удержанию пламени в различных геометрических конфигурациях камер сгорания ГПВРД при широком диапазоне параметров набегающего потока и расходов топлива [1, 2]. При этом, как правило, электрический разряд расположен вблизи стенки, что снижает эффективность и ограничивает применение этого метода в камерах сгорания больших размеров. В то же время, в большинстве работ, посвященных горению в сверхзвуковом потоке, используются различные трехмерные элементы для улучшения смешения и стабилизации фронта пламени: например, каверны [3] или клиновидные выступы [4]. Одним из наиболее распространенных вариантов для подачи топлива в канал является пилон. При этом ведутся работы, в которых помимо топлива, на пилон также вынесен разряд: исследуется влияние геометрии пилона и состава воздушно-топливной смеси на параметры плазмы электрического разряда [5]. Таким образом, выглядит перспективным использовать схему организации разряда для плазменно-стимулированного горения в сверхзвуковом потоке, рассмотренную в работах [1, 2], совместив её с простой моделью пилона. Такая геометрическая конфигурация была разработана [6], однако первые эксперименты показали необходимость доработки пилона. В данной работе предложена и экспериментально исследована модифицированная геометрия пилона с расположенными на нем инжекторами топлива и плазменным модулем.

Эксперименты выполнены на импульсной сверхзвуковой аэродинамической трубе ИАДТ-50 ОИВТ РАН Лаборатории плазменной аэродинамики и стимулированного горения [1]. В тестовой камере сгорания (КС) с поперечным сечением 60*70 мм и длиной 600 мм установлен пилон высотой 26 мм и толщиной 6 мм.

На боковых плоскостях пилона расположены 4 отверстия для инжекции топлива, а за кормой в поток вынесены два электрода для создания разряда (см. рис. 1). В качестве топлива используется этилен, массовый расход которого варьировался в диапазоне 0,5–4 г/с. Параметры воздушного потока на входе в секцию: скорость 500 м/с, статическое давление 200 Торр, полная температура 300 К. Разряд питается от источника постоянного напряжения 5кВ через балластное сопротивление, ограничивающее ток разряда. Ток разряда варьировался в диапазоне 2–7,5 А, мощность энерговыклада в разряд составила 3–5кВт (по сравнению с 10–18 кВт в предыдущих работах [1]).

В экспериментах велась скоростная видеосъемка (до 140 000к/с, см. фото разряда на рис. 2), скоростная теневая съемка (5000 к/с, см. теневой снимок во время горения этилена на рис. 3), регистрировалось изменение распределения статического давления на стенках канала (16 точек), проводились измерения тока и напряжения на разрядном промежутке.

Проведенные эксперименты показали, что разряд стабильно пробивается при указанном напряжении 5кВ, после чего горит в следе за пилоном, образуя плазменную петлю (см.рис. 2). При этом петля пульсирует: вытягивается в длину, после чего разряд перепробивается около электродов, что приводит к резкому сокращению длины плазменной области. Перепробой имеют случайный характер, интервалам времени между перепробоями соответствуют частоты 10–20кГц, а изменение длины разряда приводит к пульсациям напряжения на разряде в диапазоне 200–2000В.

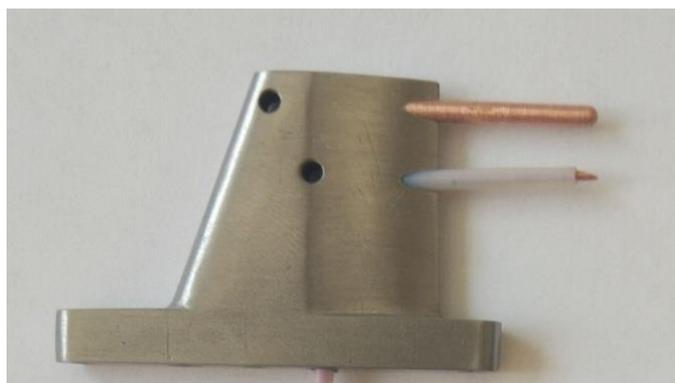


Рис. 1. Пилон с электродами

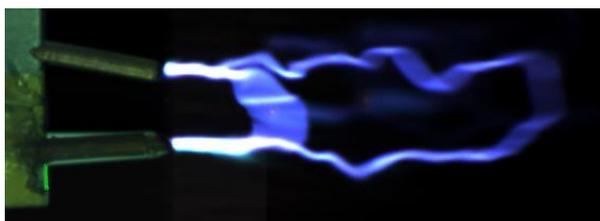


Рис. 2. Фотография разряда

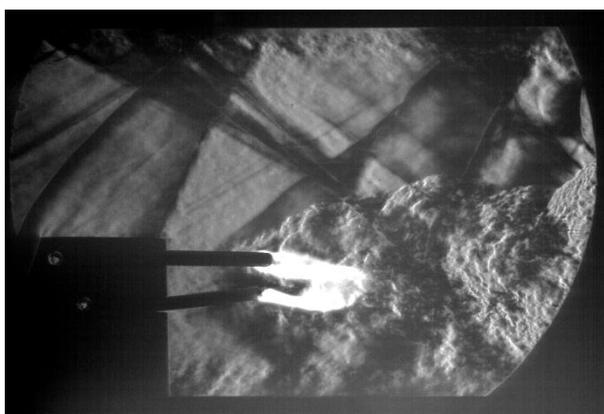


Рис. 3. Теневая визуализация горения

При подаче топлива в воздушный поток в следе за пилоном в области разряда образуется воздушно-топливная смесь. Подача топлива организована перпендикулярно набегающему потоку, что приводит к некоторому уменьшению скорости потока за пилоном. В результате этого, а также ввиду особенностей горения разряда в топливной смеси, длина плазменной области несколько уменьшается, а место перепроба наоборот удаляется от электродов, в результате чего напряжение пульсирует в диапазоне 500–1200 В. В следе за разрядом формируется область, в которой идут химические реакции, которые не приводят к существенному тепловыделению. И только ниже по течению формируется зона горения с интенсивным тепловыделением. То есть имеет место двухстадийное горение (первая область – т.н. холодное пламя), или задержка воспламенения, которая в случае движения реагирующей смеси с высокой скоростью приводит к пространственному разделению области поджига и интенсивного тепловыделения. По данным скоростной видеосъемки задержку воспламенения можно оценить, как ~2 мс.

В зависимости от расхода топлива и энерговыклада в разряд могут быть реализованы три случая – зона интенсивного тепловыделения 1) локализована в конце или за пределами тестовой секции (при низком разрядном токе), 2) локализована во второй половине тестовой секции, 3) поднимается к области создания разряда, в результате чего «холодное пламя» пропадает. Во втором и третьем случаях возможны пульсации давления и движение фронта пламени вперед-назад с частотой 60–400 Гц. Вместе с движением фронта пламени меняется максимальная длина разряда. При стабильном горении статическое давление достигало 600 торр при 200 торр в набегающем потоке, см. рис. 4. При большем зна-

чении давления канал запирался, наблюдалось кратковременное движение разряда в обратном направлении, длина разряда уменьшалась и интенсивность горения снижалась. В некоторых случаях разряд пробивался на корпус пилон.

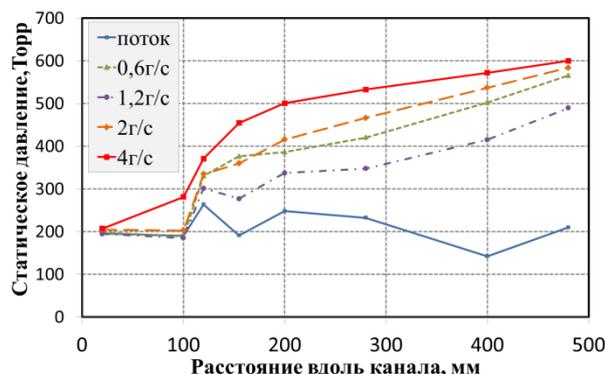


Рис. 4. Распределение статического давления по КС при варьировании расхода этилена

Таким образом, показано, что предложенная модель пилон с установленным генератором плазмы в сверхзвуковом потоке обеспечивает стабильное воспламенение и удержание пламени в широком диапазоне расходов топлива, высокую полноту сгорания, а также требует меньшего энергозатрата в разряд по сравнению с рассмотренными ранее конфигурациями: 3–5 кВт вместо 10–18 кВт. Отметим, что при полном сгорании 1 г/с этилена мощность тепловыделения составляет 48 кВт. С помощью скоростной видеосъемки и теневой визуализации показано, что при рассмотренных условиях в сверхзвуковом потоке реализуется двухстадийный режим горения этилена. Прямая визуализация двухстадийного воспламенения в сверхзвуковом потоке выполнена впервые. Показано, что задержка воспламенения составляет ~2 мс. При горении этилена регистрируется трехкратный рост давления, профиль давления зависит от энергозатрата в разряд. При горении возможна реализация пульсаций фронта пламени с частотами 60–400 Гц.

Литература

1. A.A. Firsov, K.V. Savelkin, D.A. Yarantsev, S.B. Leonov Plasma-enhanced mixing and flameholding in supersonic flow // Phil. Trans. A. 2015. V. 373. I. 2048. P. 20140337.
2. D.A. Yarantsev, A.A. Firsov, S.L. Chernyshev, A.A. Nikolaev, V. A. Talyzin, Ignition and flameholding of hydrocarbon fuel in supersonic flow by means of surface electrical discharge // AIAA Scitech. 2019. Forum – 2019. AIAA. 2019–0676.
3. S.B. Leonov, S. Elliott, C. Carter, A. Houpt, Ph. Lax, T. Ombrello Modes of plasma-stabilized combustion in cavity-based M = 2 configuration // Experimental Thermal and Fluid Science. 2021. V. 124. P. 110355.
4. В. А. Виноградов, Ю. М. Шихман, М. А. Гольдфельд, А. В. Старов Рабочий процесс и стабилизация горения керосина в модели камеры сгорания при больших скоростях потока на входе // Физика горения и взрыва. 2013. Т. 49, № 5. С.8–16.
5. С. И. Иншаков, В. В. Скворцов, А. Ф. Рожков, В. А. Шахатов, И. С. Иншаков, А. А. Успенский, А. Ю. Урусов Спектроскопические исследования продольных разрядов в сверхзвуковом потоке воздуха при инъекции пропана, этилена и кислорода в зону разряда // ТВТ. 2019. Т.57, № 6. С.835–845.
6. A.A. Firsov, E.V. Dolgov, N.S. Kolosov, D.A. Yarantsev CFD analysis of pylon equipped by plasma module for combustion in supersonic airflow // J. Phys.: Conf. Ser. 2020. V. 1698. P. 012014.

УДК 533.922

Процессы энергетического обмена в двухфракционных системах заряженных пылевых частиц

С.В.Кауфман¹, О.С. Ваулина²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Выполнено исследование процессов энергетического обмена в диссипативных системах неидентичных взаимодействующих частиц с неоднородным распределением источников тепла и/или любых

других источников стохастической кинетической энергии. Рассмотрена теоретическая модель для анализа энергетического баланса в таких системах, основанная на механизме переноса тепла, который возникает за счет передачи стохастических колебаний отдельных заряженных частиц вблизи их равновесного положения, благодаря взаимодействию между ними. В рамках данного механизма представлены простые уравнения для энергетического баланса в системе неидентичных частиц (имеющих различные массы, заряды, коэффициенты трения и температуру) для плоских и цепочечных кластерных структур.

Численно изучены условия энергетического обмена в протяженных двухфракционных ансамблях заряженных частиц различных размеров с кулоновским взаимодействием. Моделирование проводилось для двухслойных ансамблей и объемных облаков заряженных частиц в поле тяжести, а также для двумерных структур, формирующихся в электрических полях ловушки под воздействием сил пропорциональных квадрату радиуса частиц, в условиях невесомости.

Выполнено исследование процессов перераспределения стохастической кинетической энергии между фракциями частиц, имеющих разную температуру; а также перераспределения стохастической энергии по степеням свободы. Рассмотрено влияние высоких температур (приводящих к росту отклонений частиц от их состояния равновесия) на картину перераспределения стохастической энергии в анализируемых системах.

Предложена полуэмпирическая аппроксимация, зависящая от температуры тепловых источников и характерных частот системы, которая хорошо описывает процессы энергетического обмена в системах различной конфигурации.

Результаты настоящей работы применимы для систем с любым типом попарных (взаимных) взаимодействий и могут быть полезны для анализа энергетического обмена в неоднородных системах, которые представляют интерес в физике пылевой плазмы, включая лабораторные эксперименты с пылевыми частицами в плазме газовых разрядов.

Литература

1. Ваулина О.С., Петров О.Ф., Фортков В.Е., Храпак А.Г., Храпак С.А., Пылевая плазма (эксперимент и теория), М.: Физматлит, 2009. С. 316.
2. Ваулина О.С., Кауфман С.В. Перераспределение стохастической кинетической энергии в ансамблях неидентичных заряженных частиц // Физика Плазмы. 2020. Т. 46. С. 721.

УДК 537.52

Распределение интенсивности излучения, инициируемого импульсным разрядом по поверхности феррита

С.Н. Андреев², А.В. Бернацкий², Г.А. Душкин^{1,2}, С.Н. Цхай², И.Н. Тиликин², С.Ю. Савинов²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Работа посвящена исследованию пространственного распределения интенсивности высокоэнергетического излучения, инициируемого разрядом по поверхности феррита вдоль оси разряда (в отличие от большинства работ по теме [1]).

Источник импульсного напряжения разряда – модифицированный рентгеновский аппарат Памир-300, который по паспортным данным обеспечивает напряжение до 300 кВ с фронтом нарастания ~1 нс. Подробное описание экспериментальной установки дано в [2]. Феррит марки М1000НН крепился при помощи медных электродов, регистрация излучения производилась со стороны анода при помощи сцинтиллятора (полистирол, легированный π -терфенилом и РОРОР) со временем отклика ~2 нс, защищенного от видимого излучения разряда фильтрами. Позиционирование приёмника обеспечивалось программно-управляемым транслятором, расположенным на расстоянии 76 мм от торца феррита и позволяющим с точностью до 0.1 мм перемещать приёмник внутри квадрата 10×10 см². В качестве приёмника излучения сцинтиллятора использовался обладающий временным разрешением ~2 нс ФЭУ-87 с записью на осциллограф TDS 3032 с полосой пропускания 300 МГц. Для задания пути разряда была нанесена проводящая дорожка («strip» на рис. 1). Благодаря этому стала возможна реги-

страция излучения как напротив плазменного канала, так и в стороне от него. Для ликвидации движущегося в исследуемом направлении пучка электронов между ферритом и приёмником размещался постоянный магнит.

Результатом измерений в данной конфигурации было обнаружение на сигнале осциллографа пиков (как правило, двух) флуоресценции шириной на полувысоте ~ 5 нс. Для интенсивности первого из них в исследуемом направлении обнаруживается анизотропия (рис. 1). Ширина на полувысоте полученного максимума – ~ 7 мм, что соответствует угловой расходимости – $\sim 3^\circ$. Энергетика регистрируемого излучения по фильтрам оценивается >750 эВ. Полученные результаты согласуются с ранними исследованиями, проведёнными в сильноточном разряде по поверхности феррита [3].

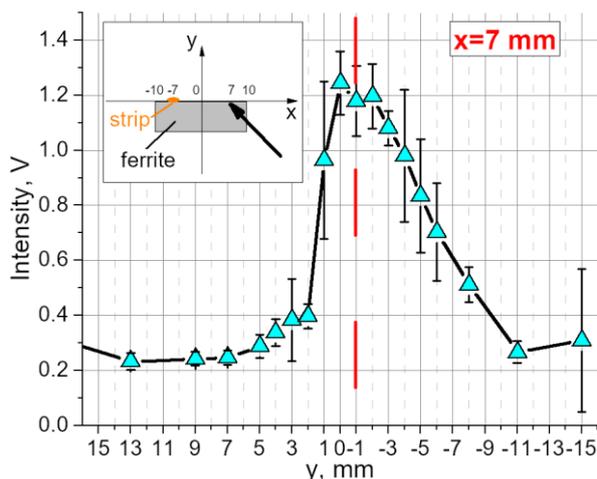


Рис. 1: Пространственное распределение интенсивности пика излучения в направлении вдоль оси разряда

Работа выполнена за счет средств гранта Российского научного фонда (проект № 19-79-30086).

Литература

1. *Tilikin I.N., Tskhai S.N., Shelkovenko T.A., Savinov S.Yu., Pikuz S.A.* Generation of Intense UV Radiation during High-Current Breakdown over a Ferrite Surface // *Plasma Physics Reports* (2018) 44. P. 600–604.
2. *Андреев С.Н., Бернацкий А.В., Душкин Г.А., Цхай С.Н., Пикуз С.А., Тиликин И.Н., Шелковенко Т.А., Савинов С.Ю.* Пространственные характеристики излучения, инициируемого разрядом по поверхности феррита // *Краткие сообщения по физике ФИАН*. 2021. Т. 48, № 10. С. 43–51.
3. *Tilikin I.N., Pestovskii N.V., Pikuz S.A., Shelkovenko T.A., Tskhai S.N., Savinov S.Yu.* Coherent x-ray radiation induced by high-current breakdown on a ferrite surface // *arXiv: 1910.13851v2*.

УДК 536.7

Квантовое молекулярно-динамическое моделирование железа в твердой и жидкой фазах в окрестности плавления

И.С. Гальцов^{1,2}, Д.В. Минаков^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Уравнение состояния железа, являющегося важным материалом конструкции ядерных энергетических установок, очень важно для анализа безопасности существующих и перспективных атомных реакторов.

Основной массив экспериментальных данных по тепловому расширению твердого и жидкого железа ограничен температурой 2.5 кК. Однако при более высоких температурах экспериментальной информации недостаточно. Более того, наблюдается неоднозначность в наклоне кривой теплового расширения жидкого железа при высоких температурах, полученной разными авторами. Таким образом, несмотря на огромную значимость уравнения состояния железа для атомной энергетики, на текущий момент существует значительная неопределенность в положении границы двухфазной области жидкость-газ для этого металла.

В тех областях термодинамических параметров, где на сегодняшний день затруднено или невозможно проведение эксперимента, либо его результаты плохо воспроизводимы, возможно получить надежные данные о свойствах материалов при помощи первопринципных расчетов. Первопринципный метод квантовой молекулярной динамики (КМД), основанный на теории функционала плотности (DFT – density functional theory) [1], позволяет учесть как свойства электронной подсистемы, так и движение ионов, и поэтому может использоваться для моделирования свойств жидких металлов. Указанный метод КМД на протяжении последних нескольких десятилетий активно используется для моделирования разнообразных явлений, при этом обеспечивая отличное согласие результатов расчетов с известными экспериментальными данными.

В данной работе выполнен анализ сходимости результатов расчетов по параметрам моделирования, представлена точка Кюри железа, полученная на основе КМД-расчетов, а также восстановлена кривая теплового расширения железа в окрестности плавления в твердой и жидкой фазах. В статье [2] значительное внимание уделено влиянию спиновой поляризации на термодинамические свойства жидкого железа. В ходе данной работы было проанализировано влияние учета спиновой поляризации на воспроизведение кривой теплового расширения железа с помощью метода КМД.

Эта работа была выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 20-79-10398).

Литература

1. *Martin R.M.* Electronic structure: basic theory and practical methods. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
2. *Korell J.-A., French M., Steinle-Neumann G., and Redmer R* // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122 P. 086601.

УДК 533.9.082.76

Исследование энергетического распределения ионов диффузного дугового разряда на горячем катоде (CeO₂) в области за анодом с помощью многосеточного анализатора

С.Б. Ветрова^{1,2}, Н.Н. Антонов², А.Д. Мельников^{1,2}, Р.А. Усманов², А.В. Гавриков²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединенный институт высоких температур РАН

Плазменная сепарация – один из перспективных методов переработки радиоактивных отходов и отработавшего ядерного топлива [1, 2], развитие которого является основным направлением деятельности нашей лаборатории [3, 4]. Данная технология включает в себя такие этапы, как конвертация сепарируемого вещества в плазменное состояние, создание конфигурации электромагнитного поля, обеспечивающей пространственное разделение компонент с различным отношением заряда к массе, генерация буферной плазмы, компенсирующей влияние объемного заряда на траектории сепарируемых частиц, а также сбор разделенных компонент. К методу перевода рабочего вещества в плазменное состояние как к одному из ключевых элементов технологии предъявляются строгие требования, такие как близкая к 100% степень ионизации инжектируемой в сепаратор плазмы, отсутствие многозарядных ионов, высокая производительность и др. Нашей лабораторией разрабатываются различные способы решения данной задачи, один из которых – использование вакуумного дугового разряда в качестве источника плазмы сепарируемого вещества [5–7].

Характерной особенностью задачи переработки ОЯТ является использование в качестве рабочего вещества оксидных материалов, свойства которых отличны от свойств чистых металлов. Основным модельным веществом, используемым нашей лабораторией, является диоксид церия (CeO₂), как оксид, наилучшим образом соответствующий параметрам отработавшего ядерного топлива [8]. В качестве одного из главных результатов исследований последних лет стоит отметить инициирование диффузного дугового разряда с использованием горячего катода, изготовленного из диоксида церия [9], что, насколько нам известно, не достигалось ранее другими исследователями. Процессы, протекающие в разряде с использованием неметаллического катода, изучены мало, и данные о средней энергии частиц плазмы могут помочь в понимании механизма их ускорения. Поэтому целью данной работы стало измерение энергетического распределения ионов плазмы описанного выше разряда с помощью специально разработанного многосеточного анализатора.

На изображена схема экспериментальной установки, используемой в исследовании. Нагрев молибденового тигля и размещенного в нем катода происходит электронно-лучевым методом. В ходе эксперимента катод заземлен, а для инициирования разряда к аноду, находящемуся на расстоянии 30 мм от катода, прикладывается напряжение до 400 В. В заанодной области, на расстоянии 30 см от анода, располагается многосеточный анализатор, входное окно которого параллельно плоскости анода. Путем варьирования анализирующего потенциала зонда регистрируется вольт-амперная характеристика, дифференцирование которой позволяет получить энергетическое распределение исследуемых частиц.

Приведем характерные параметры эксперимента: давление в камере – 10^{-4} торр, температура тигля – $1930\text{ }^{\circ}\text{C}$, ток разряда – 60 А, разность потенциалов между анодом и катодом – около 12 В. Из предыдущих исследований также известно, что концентрация плазмы в заанодной области составляет порядка 10^{10} см^{-3} , а температура электронов – 0,5-1 эВ. Потенциалы электродов многосеточного анализатора задаются относительно потенциала катода, при этом к отталкивающему электроду приложен потенциал -60 В, анализирующее напряжение варьируется от 0 до 30 В, а коллектор заземлен; размер ячейки сетки электродов составляет 100 мкм. На рисунке приведен характерный вид энергетического распределения, измеренного в эксперименте, с максимумом распределения приходящимся на значение около 13,5 эВ.

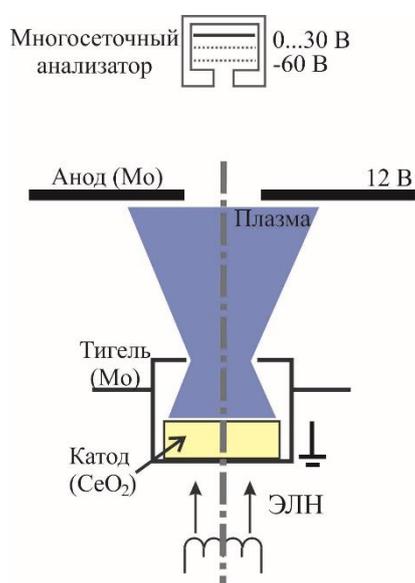


Рис. 7. Схема экспериментальной установки

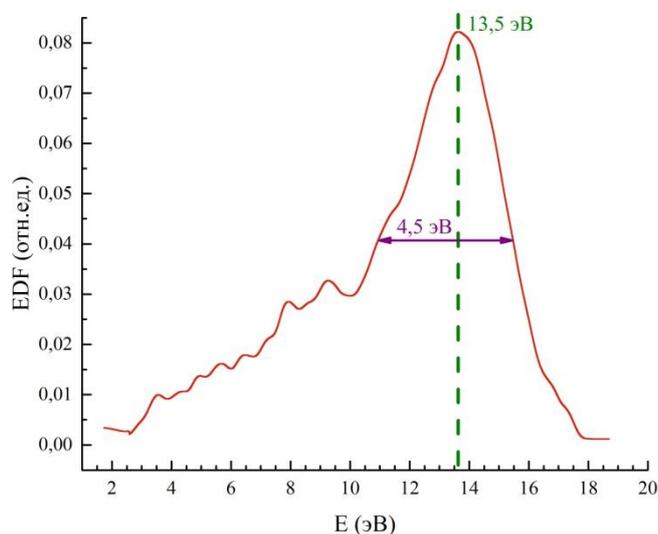


Рис. 8. Пример измеренного энергетического распределения

Итак, в ходе эксперимента для диффузного дугового разряда с горячим катодом из диоксида церия с помощью многосеточного анализатора определена средняя энергия ионной компоненты плазмы. При этом показано, что вследствие неустойчивости параметров разряда (температуры катода, напряжения разряда) энергия исследуемых частиц также испытывает заметные (~10%) колебания. Среднее по эксперименту значение в 13,5 эВ вероятно связано с катод-анодной разностью потенциалов (~12 В), что требует дополнительного подтверждения. Полученные результаты помогут расширить понимание процессов в диффузном дуговом разряде при использовании в качестве материала катода оксидного материала, а также важны для метода плазменной сепарации в целом, так как траектории сепарируемых частиц напрямую зависят от их энергетических параметров.

Исследование выполнено при поддержке гранта Президента РФ для молодых ученых-кандидатов наук (МК-5652.2021.1.2).

Литература

1. Zweben S.J., Gueroult R. and Fisch N.J. Plasma mass separation // Physics of plasmas. 2018. V. 25.
2. Долголенко Д.А. и Муромкин Ю.А. О разделении смесей химических элементов в плазме // Успехи физических наук. 2017. Т. 187, № 10.
3. Liziakin G. et al. Plasma mass separation in configuration with potential well // J. Phys. D: Appl. Phys. 2021. V. 54.
4. Smirnov V. P. et al. Investigation of the influence of injection parameters on particles motion in electric and magnetic fields for designing plasma separation technique // Plasma Physics Reports. 2018. V. 44, № 12.
5. Полищук В.П. [и др.]. Вакуумные дуговые разряды с диффузной катодной привязкой (обзор) // Теплофизика высоких температур. 2020. Т. 58, № 4.

6. *Usmanov R.A. et al.* Diffuse vacuum arc with heated cathode made of ceramic (CeO₂) and metal (Cr) mixture // *Plasma Sources Sci. Technol.* 2020. V. 29.
7. *Мельников А.Д. [и др.]*. Исследование зарядового состава плазмы диффузной вакуумной дуги на горячем катоде времяпролетным методом // *Физика плазмы.* 2020. Т. 46, № 6.
8. *Волков Л.С. [и др.]*. Выбор смесей, моделирующих ОЯТ оксидного типа, для экспериментов по плазменной сепарации и теоретических расчётов // *Труды 63-й Всероссийской научной конференции МФТИ. Фундаментальная и прикладная физика.* М.: МФТИ, 2020.
9. *Usmanov R.A. et al.* Diffuse vacuum arc on cerium dioxide hot cathode // *Physics of plasmas.* 2018. V. 25.

УДК 533.9.22

Исследования криогенной пылевой плазмы в тлеющем разряде постоянного тока

Н.В. Горшунгов^{1,2}, Р.Е. Болтнев^{2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

³Филиал ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова

Представлены результаты экспериментального исследования вольт-амперных характеристик тлеющего разряда постоянного тока в гелии в диапазоне температур от 1.6 до 160 К. Выполнены анализ полученных результатов и их сравнение с более ранними результатами, полученными как для тлеющего разряда [1], так и для плазменно-пылевых структур при гелиевых температурах [2]. На рис. 1 представлены значения приведённой напряженности электрического поля, измеренные в различных режимах тлеющего разряда.

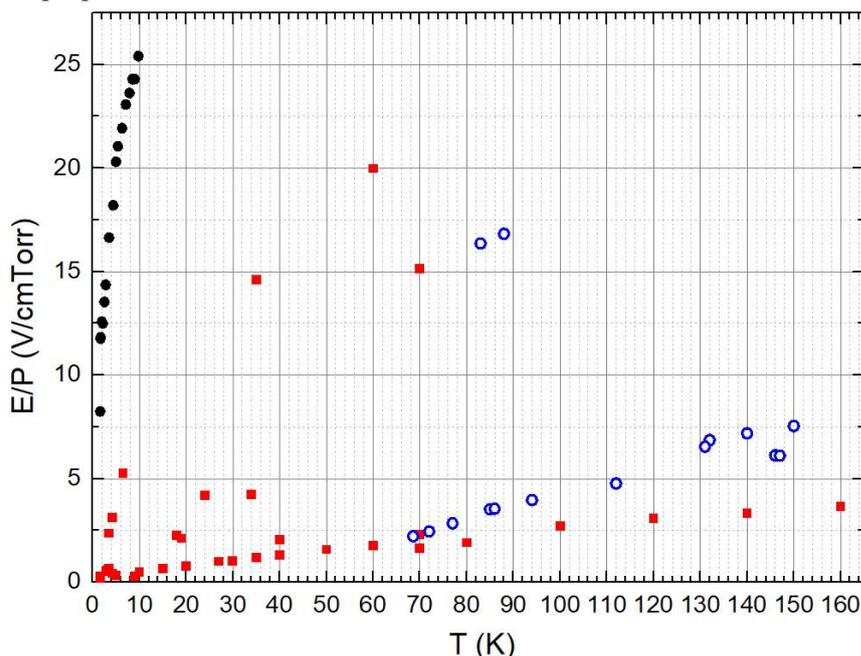


Рис. 1. Значения приведённой напряженности электрического поля, полученные в экспериментах без плазменно-пылевой структуры (красные квадраты), с плазменно-пылевыми структурами (синие кольца), с плазменно-пылевыми структурами в тёмной моде тлеющего разряда (чёрные круги)

Литература

1. *Асиновский Э.И., Кириллин А.В., Марковец В.В.* Тлеющий разряд в гелии при криогенных температурах // *ТВТ* 1975. Т. 13. С. 933.
2. *Болтнев Р.Е., Васильев М.М., Кононов Е.А., Петров О.Ф.* Явления самоорганизации в криогенной газоразрядной плазме: формирование пылевого облака наночастиц и плазменно-пылевых волн // *ЖЭТФ* 2018. Т. 153. С. 671.

Расчёт аксиально несимметричного распределения потенциала в цилиндрическом плазменном столбе с термокатодом

А.П. Ойлер^{1,2}, Г.Д. Лизякин¹, А.В. Гавриков^{1,2}

¹Объединенный институт высоких температур РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Перед современной атомной энергетикой среди прочих стоит такая актуальная задача как переработка отработавшего ядерного топлива. Весьма многообещающими являются плазменные методы переработки, предполагающие перевод вещества в плазменное состояние и последующее разделение тяжёлых и лёгких компонентов в электрических и магнитных полях. На этом принципе базируется экспериментальный стенд LaPlaS-1 [1, 2].

В установке движение заряженных частиц происходит в электрическом поле отражательного разряда. Для увеличения радиального электрического поля используется термоэмиссионный катод из LaB₆, который позволяет сильно влиять на распределение потенциала [3]. Также для влияния на профиль потенциала в плазме используются торцевые электроды в различных конфигурациях.

В аксиально симметричной конфигурации траектории сепарируемых частиц лежат только в третьей части вакуумной камеры. Если термоэмиссионный катод сместить в сторону от инжектора разделяемых частиц, то активно используемая область увеличится и повысится коэффициент сепарации. Это смещение приводит к асимметрии распределения потенциала плазмы. Главной целью данной работы является расчет подобного асимметричного распределения потенциала плазмы при асимметричном расположении торцевых электродов.

В работе [4] была сформулирована электротехническая модель, описывающая электрический потенциал на оси плазменного столба с продольным магнитным полем. В работе [5] эта модель была расширена и с её помощью удалось рассчитать радиальное распределение потенциала плазмы. На рис. 1 изображена соответствующая эквивалентная схема плазменного разряда, исходя из которой было составлено уравнение описывающее воспроизведение потенциала торцевых электродов в плазме в аксиально симметричном разряде:

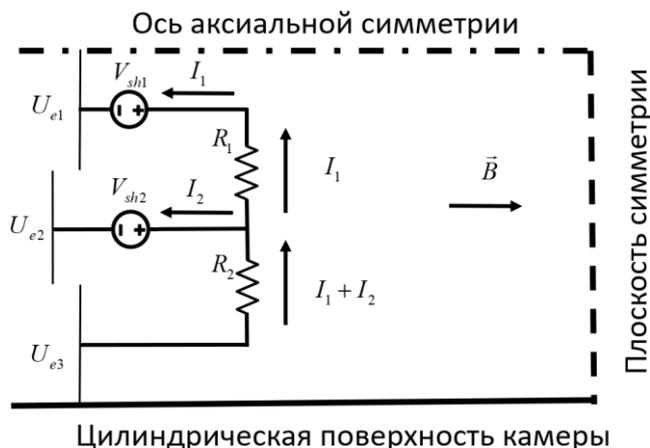


Рис. 1. Эквивалентная электрическая схема плазменного столба [5]

$$U(r) = U(r_{ex}) - \int_{r_{ex}}^r \left(U'(\hat{r}) + A_5 + \frac{A_4}{U'(\hat{r}) + A_5} \right) \frac{d\hat{r}}{n_e(\hat{r})\hat{r}} \int_0^{\hat{r}} \left(A_1 \exp\left(\frac{U_e(\vartheta) - U(\vartheta)}{A_3} \right) - A_2 \right) n_e(\vartheta) \vartheta d\vartheta. \quad (1)$$

В настоящей работе эта модель была расширена до двухмерной, на которую не накладываются предположения об аксиальной симметрии разряда. В работе решалось уравнение Пуассона:

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(r, \theta) = -\frac{1}{L} j_{el}(r, \theta), \quad (2)$$

где $\vec{j}(r, \theta) = -\sigma(r, \theta) \nabla U(r, \theta)$ – это плотность тока в плазме поперёк магнитного поля, а $j_{el}(r, \theta)$ – плотность тока на торцевые электроды. Тогда уравнение (2), можно представить в виде

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\nabla U(r, \theta) + A_5}{(\nabla U(r, \theta) + A_5)^2 + A_4} n_e(r, \theta) \vec{\nabla} U(r, \theta) \right) = n_e(r, \theta) \left(A_1 \exp\left(\frac{U_e(r, \theta) - U(r, \theta)}{A_3}\right) - A_2 \right). \quad (3)$$

В уравнениях (1) и (3) A_1 - A_5 – числовые константы. Согласно этим моделям, было построено численное решение уравнения (3). Корректность решения устанавливалась сравнением с решением уравнения (1) и экспериментальными данными из работы [5] в случае симметричной конфигурации торцевых электродов. Также были произведены расчёты потенциала в двухмерной модели, конфигурация электродов в которой не является аксиально симметричной (рис. 2). Согласно этим расчётам, можно делать предположения о том, какой ток термоэмиссии необходим для конструирования оптимального профиля потенциала, а также, каковы будут траектории сепарируемых частиц в вакуумной камере масс-сепаратора и соответственно, как можно улучшить качество сепарации.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-19-00716.

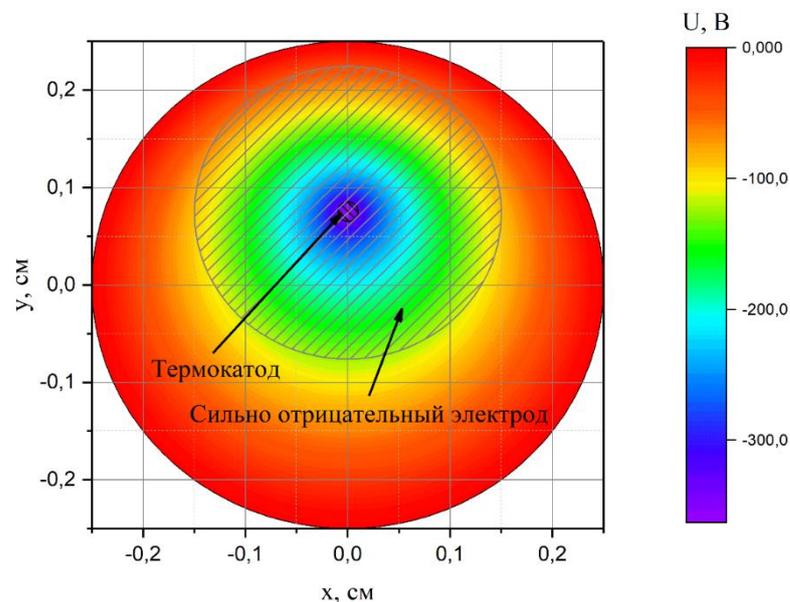


Рис. 2. Расчёт распределения потенциала со смещённым термокатодом и сильно отрицательным электродом

Литература

1. *Liziakin G. et al.* Experimental demonstration of plasma mass separation in a configuration with a potential well and crossed electric and magnetic fields // *Plasma Physics and Controlled Fusion*. 2021. Т. 63, № 3. С. 032002.
2. *Liziakin G. et al.* Plasma mass separation in configuration with potential well // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2021. Т. 54, № 41. С. 414005.
3. *Jin S. et al.* Plasma flows generated by an annular thermionic cathode in a large magnetized plasma // *Physics of Plasmas*. 2019. Т. 26, № 2. С. 022105.
4. *Liziakin G., Gavrikov A., Smirnov V.* Negative electric potential in a cylindrical plasma column with magnetized electrons // *Plasma Sources Science and Technology*. 2020. Т. 29, № 1. С. 015008.
5. *Liziakin G. et al.* Radial distribution of the plasma potential in a cylindrical plasma column with a longitudinal magnetic field // *Journal of Plasma Physics*. 2021. Т. 87, № 4.

Масс-спектрометрический анализ газа, истекающего в вакуум при испарении диоксида церия в молибденовых, танталовых и вольфрамовых тиглях

Л.С. Волков^{1,2}, Н.Ю. Бабаева², Н.Н. Антонов², А.Д. Мельников^{1,2}, А.В. Гавриков²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²ФГБУН Объединённый институт высоких температур РАН

Данная работа относится к циклу исследований, направленных на создание технологии плазменной сепарации. Это разрабатываемый в ОИВТ РАН способ рекуперации отработавшего ядерного топлива (ОЯТ). Цель плазменной сепарации – отделение тяжёлых атомов актинидов (способных поддерживать цепную ядерную реакцию) от лёгких продуктов распада (так называемой «ядерной золы»). Метод плазменной сепарации предполагает конвертацию ОЯТ в газ, а затем в поток однократно ионизированной низкотемпературной плазмы, и разделение этого потока в буферной плазме и специальной конфигурации электрического и магнитного полей, в которой форма траектории иона зависит от соотношения его массы и заряда [1–2].

Изучение процесса испарения оксидов (в том числе при тигельном нагреве) необходимо для разработки технологии плазменной сепарации, поскольку большинство ядерных реакторов в России работают на оксидном ядерном топливе [3], и, соответственно, их ОЯТ представляет собой смесь оксидов многих элементов. Данное исследование сосредоточено на CeO_2 как одном из основных модельных веществ, применяющихся в экспериментах по плазменной сепарации вместо UO_2 [4]. К тому же, одна из предлагаемых сфер применения плазменной сепарации – это переработка смеси оксидов минорных актинидов (Am, Cm) и лантаноидов, в том числе CeO_2 .

В наших экспериментах препарат (таблетки спечённого стехиометрического CeO_2) помещался в металлический (Mo, Ta или W) тигель, находившийся в вакууме (при давлении остаточных газов порядка 10^{-6} торр). Каждый тигель представлял собой полый открытый сверху цилиндр с внутренним радиусом 11 мм, и нагревался индукционно. Температура внешней поверхности тигля измерялась двухлучевым пирометром CHINO IR-CZH, работающим на длинах волн 0,9 и 1,55 мкм. Масс-спектр истекающего из тигля газа исследовался с помощью квадрупольного масс-анализатора ХТ300(М) производства Extorr Inc с разрешением 0,1 а.е.м и диапазоном 1.300 а.е.м. Ось масс-анализатора была направлена на отверстие тигля. Энергия ионизирующих электронов в масс-анализаторе составляла 70 эВ. В отличие от большинства других работ, посвящённых испарению CeO_2 (например, [5–6]), в нашей работе препарат испарялся не в ячейке Кнудсена, а в открытом тигле в вакууме. При этом в исследуемом диапазоне температур находилась переходная зона между областями применимости формулы Герца-Кнудсена и гидродинамического описания течения газа. В тигле молекулы паров модельного вещества имели возможность несколько раз столкнуться со стенками тигля, прежде чем покинуть его.

На масс-спектрах можно было наблюдать ионные токи Ce^+ , CeO^+ и CeO_2^+ . На рис. 1 отображена зависимость нормированных ионных токов от температуры, для трёх тиглей. Вообще говоря, соотношение ионных токов на масс-спектрограмме не всегда отражает реальный состав пара, поскольку столкновение нейтральной молекулы с электроном в масс-спектрометре может приводить не только к ионизации молекулы, но и к её диссоциации (фрагментации). Интерпретировать масс-спектры, согласно [5–6], нужно следующим образом. Ионы CeO_2^+ образуются в масс-спектрометре только в результате ионизации молекул CeO_2 . Ионы CeO^+ образуются как в результате ионизации молекул CeO , так и в результате фрагментации молекул CeO_2 . Ионы Ce^+ образуются только из-за фрагментации молекул оксидов церия.

При испарении модельного вещества в молибденовом и вольфрамовом тигле оказалось, что соотношение ионных токов Ce^+ , CeO^+ и CeO_2^+ слабо зависит от температуры, и приблизительно совпадает с таковым в работе [6], в которой исследовался равновесный состав насыщенного пара над диоксидом церия при испарении из ячейки Кнудсена. Следовательно, как и в работе [6], в нашем случае пар над молибденовым и вольфрамовым тиглями с CeO_2 состоит в основном из CeO_2 и нескольких процентов CeO . Для молибденового тигля были сняты две серии масс-спектров в двух диапазонах температур: 1800...1950°С и 1850..2100°С. При переходе между сериями было увеличено расстояние между масс-спектрометром и тиглем. Как можно видеть, это не отразилось на соотношении ионных токов Ce^+ , CeO^+ и CeO_2^+ . В первом диапазоне температур экспериментально выявленная зависимость ионного тока $j_{\text{CeO}_2^+}$ от температуры T наилучшим образом аппроксимируется формулой:

$$\lg j_{\text{CeO}_2^+} = \tilde{A} - \frac{B}{T} \quad (1)$$

Причём коэффициент B в формуле (1) оказывается равен $(27500 \pm 800 \text{ K}^{-1})$, что довольно близко к коэффициенту $B = 26580 \text{ K}^{-1}$ из установленной в работе [6] зависимости давления насыщенного равновесного пара P над диоксидом церия от температуры T (в форме Аррениуса):

$$\lg P = A - \frac{B}{T} \quad (2)$$

При испарении препарата в танталовом тигле, как можно судить по масс-спектру, газ, истекающий из тигля, состоял в основном из молекул CeO ; а молекулы CeO_2 практически отсутствовали. По-видимому, это обусловлено химическими реакциями CeO_2 с материалом тигля.

Результаты данного исследования подтверждают предположение из работы [6] о том, что состав паров над диоксидом церия зависит от материала ёмкости, в котором находится испаряемый препарат. Также данное исследование показало, что при испарении диоксида церия в трёх тиглях (Mo , Ta , W), в составе истекающего газа не наблюдались ионы Mo^+ , Ta^+ , W^+ соответственно, а также ионные токи их соединений (в пределах чувствительности и рабочего диапазона масс-анализатора). Эта информация полезна для объяснения результатов других работ, посвящённых плазменной сепарации [4].

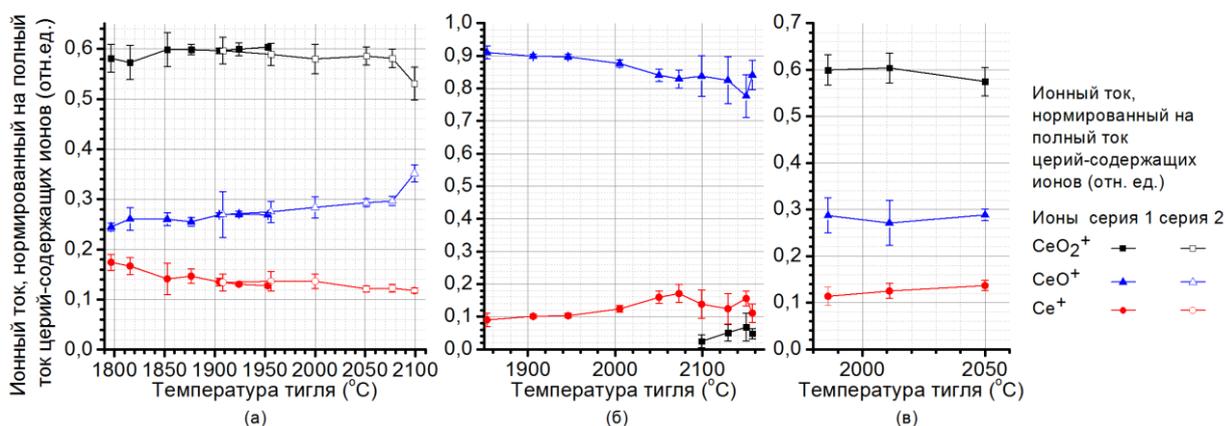


Рис. 1. Ионный ток, нормированный на полный ток церий-содержащих ионов. Энергия ионизирующих электронов 70 эВ. Испарение диоксида церия из: (а) молибденового тигля (две серии), (б) танталового тигля, (в) вольфрамового тигля

Литература

1. *Liziakin G. et al.* Plasma mass separation in configuration with potential well // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2021. V. 54. P. 414005. doi:10.1088/1361-6463/ac128e
2. *Муромкин Ю. А. Долголенко Д.А.* О разделении смесей химических элементов // *УФН*. 2017. Т. 187, № 10. doi:0.3367/UFNr.2016.12.038016
3. *Колобашкин В.М. [и др.]*. Радиационные характеристики облученного ядерного топлива М.: Энергоатомиздат, 1983. 385 с.
4. *Usmanov R.A. et al.* Diffuse vacuum arc on cerium dioxide hot cathode // *Physics of Plasmas*. 2018. V. 25. P. 063524. doi:10.1063/1.5037674
5. *Piacente V. et al.* Dissociation energy of CeO₂ and Ce₂O₂ molecules // *The Journal of Chemical Physics*. 1973. V. 59(1). P. 31–36. doi:10.1063/1.1679807
6. *Marushkin K.N. et al.* Mass spectrometric study of vapor composition over the Ce-O system // *Inorg Mater*. 2000. V. 36. P. 793–798. doi:10.1007/BF02758599

Измерение спектров колебаний потенциала плазмы в отражательном разряде с термокатодом

М.А. Валинуров^{1,2}, А.В. Гавриков^{1,2}, Г.Д. Лизякин¹, А.П. Ойлер^{1,2}

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур РАН (ОИВТ РАН)

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Среди прочих задач перед атомной энергетикой стоит такая актуальная проблема как переработка отработавшего ядерного топлива (ОЯТ). Одним из возможных способов её решения видится использование плазменных методов переработки ОЯТ, предполагающих перевод сепарируемого вещества в плазменное состояние и последующее его разделение при помощи скрещенных полей на тяжелую и легкую компоненту.

Одной из существующих проблем при применении плазменных методов сепарации, основанных на использовании масс-фильтра Т. Окавы [1] и масс-сепаратора В.П. Смирнов [2, 3], является наличие возмущений потенциала плазмы, таких как, например, неустойчивость Саймона-Хоха [4]. Подобные возмущения могут внести изменения в процесс сепарации.

В данной работе проводилось исследование колебаний потенциала плазмы при помощи плавающего зонда. Полученные данные анализировались при помощи методов фурье-анализа для выявления частот колебаний. Исследования проводились в цилиндрической установке длиной 220 см, с внутренним диаметром 86 см (см. рис. 1), при наличии аксиального магнитного поля 1.4 кГс. Для создания радиального электрического поля использовался отражательный разряд с термоэмиссионным катодом. Радиальное электрическое поле составляло 15 В/см, а характерный масштаб градиента электронного давления равнялся 40 единицам. В установку с постоянной скоростью подавался рабочий газ – аргон. В плазме по всей видимости также присутствовали примеси ионов железа, появляющиеся из-за эрозии торцевых электродов. Результаты сравнивались с рассчитанными характерными частотами системы.

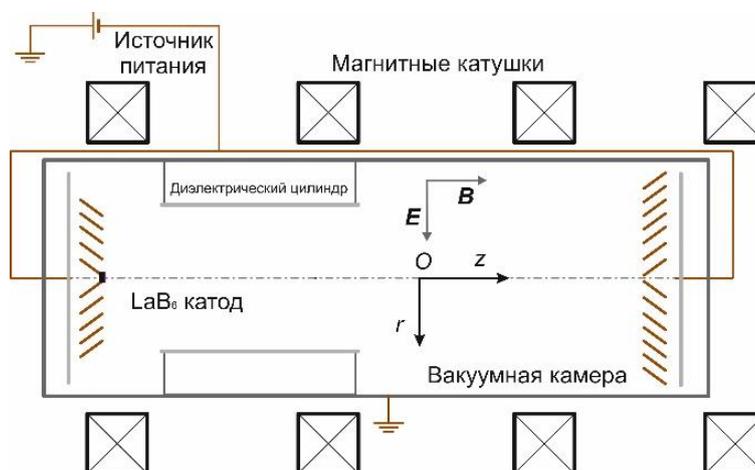


Рис. 1. Схема экспериментальной установки

Рассчитанные характерные частоты системы представлены в табл. 1. Сравнение этих частот с результатами анализа фурье-спектров позволило предположить наличие примесей ионов серебра и свинца, служащих в экспериментах с сепарацией модельными веществами легкой и тяжелой компонент ОЯТ соответственно.

Таблица 1. Характерные частоты системы

ω_{pe}	ω_{ce}	ω_{piAr}	ω_{res_e}	ω_S	ω_{ciAr}	ω_{ciFe}	ω_{ciAg}	ω_d	ω_{ciPb}	ω_{res_Ar}
300 МГц- 9 ГГц	3.9 ГГц	5 МГц- 50 МГц	2.5 МГц	30 кГц- 150 кГц	53 кГц	38 кГц	20 кГц	4 кГц- 17 кГц	10 кГц	3 кГц

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-19-00716.

Литература

1. *Ohkawa T. and Miller R.L.* Phys. Plasmas 9, 5116 (2002).
2. *Liziakin G. et al.* Plasma mass separation in configuration with potential well // Journal of Physics D: Applied Physics. 2021. Т. 54, № 41. С. 414005.
3. *Liziakin G. et al.* Experimental demonstration of plasma mass separation in a configuration with a potential well and crossed electric and magnetic fields // Plasma Physics and Controlled Fusion. 2021. Т. 63, № 3. С. 032002.
4. *Smolyakov A.I. et al.* Fluid theory and simulations of instabilities, turbulent transport and coherent structures in partially-magnetized plasmas of discharges // Plasma Physics and Controlled Fusion. 2016. Т. 59, № 1. С. 014041.

УДК 533.922

Определение амплитуды нелинейной кильватерной волны, генерируемой в плазме интенсивным фемтосекундным лазерным импульсом

Ю.Р. Гайничина^{1,2}, Н.Е. Андреев^{2,1}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Рассмотрено аналитическое решение уравнения для потенциала кильватерной волны, генерируемой фемтосекундным лазерным импульсом в линейном приближении, а также проведено сравнение этого решения с численным решением уравнения в нелинейном случае при ультрарелятивистской амплитуде лазерного импульса. Проанализирована зависимость амплитуды кильватерной волны от амплитуды и длительности лазерного импульса.

Из уравнений Максвелла и гидродинамических уравнений для электронов плазмы получены следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 q_{\parallel}}{\partial t^2} + \omega_p^2 \frac{q_{\parallel}}{\sqrt{1+q^2}} &= -\frac{cq_{\parallel}}{\sqrt{1+q^2}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial q_{\parallel}}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{1+q^2} \right) - c \frac{\partial^2 \sqrt{1+q^2}}{\partial x \partial t}, \\ \frac{\partial^2 q_{\perp}}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 q_{\perp}}{\partial x^2} + \omega_p^2 \frac{q_{\perp}}{\sqrt{1+q^2}} &= -\frac{cq_{\perp}}{\sqrt{1+q^2}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial q_{\parallel}}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{1+q^2} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

здесь c – скорость света, $\omega_p = \sqrt{4\pi e^2 n_0 / m}$ – плазменная частота (e, m, n_0 – заряд, масса электрона и начальная концентрация ионов плазмы соответственно), $\frac{1}{q} = \frac{1}{p} / mc$ – безразмерный импульс электронной жидкости в расчете на один электрон, $q^2 = q_{\perp}^2 + q_{\parallel}^2$, $q_{\perp}, q_{\parallel} = q_x$ – поперечная и продольная относительно направления распространения лазерного импульса Ox компоненты безразмерного импульса электрона. Эти уравнения написаны в одномерном приближении, когда поперечный размер лазерного импульса, определяемой условиями фокусировки излучения, намного превышает его длину, что зачастую выполняется для фемтосекундных лазерных импульсов, используемых для кильватерного ускорения электронов.

Из уравнения для продольной компоненты импульса электрона следует уравнение для потенциала кильватерной волны $\Phi = (1+q^2)^{1/2} - uc^{-1}q_{\parallel}$, который определяет продольную компоненту напряженности электрического поля кильватерной волны $E_{\parallel} = -(mc^2/e)d\Phi/d\xi$, действующую на ускоряемые электроны:

$$\frac{d^2\Phi}{d\xi^2} + \frac{\omega_p^2}{c^2 - u^2} \left\{ 1 - \frac{u}{c} \frac{\Phi}{[\Phi^2 - (1-u^2/c^2)(1+q_{\perp}^2)]^{1/2}} \right\} = 0. \quad (2)$$

Здесь предполагается, что лазерный импульс, генерирующий кильватерную плазменную волну, распространяется с постоянной групповой скоростью u и использована сопутствующая переменная

$\xi = x - ut$. Учитывая, что групповая скорость лазерного импульса в разреженной плазме близка к скорости света, и полагая, что при этом выполняется неравенство $(1 - u^2/c^2) \ll \Phi^2/(1 + q_{\perp}^2)$, получим уравнение

$$\frac{d^2\Phi}{d\xi^2} + \frac{\omega_p^2}{2c^2} \left(1 - \frac{1 + |a(\xi)|^2/2}{\Phi^2} \right) = 0, \quad (3)$$

где поперечный импульс электронов, осциллирующих в лазерном поле, выражен через комплексную огибающую напряженности электрического поля лазерного импульса $a(\xi) = eE_L / (mc\omega)$, ω – частота лазерного излучения, и пренебрежено динамикой лазерного импульса при его распространении в разреженной плазме.

В случае слабого релятивизма $|a| < 1$ кильватерную волну можно считать линейной $\Phi = 1 + \delta\Phi$, $|\delta\Phi| \ll 1$, тогда линеаризованное по $|\delta\Phi| \ll 1$ уравнение (3) имеет аналитическое решение [1, 2], и зависимость амплитуды волны от интенсивности и длительности лазерного импульса известна.

Численное решение уравнения (3) показало, что в случае ультрарелятивистской амплитуды лазерного импульса $|a| > 1$ нелинейность генерируемой кильватерной плазменной волны существенна: наблюдается значительное изменение как амплитуды, так и формы волны по сравнению с существующим аналитическим решением линеаризованной задачи. Это указывает на необходимость дальнейших исследований характеристик нелинейной кильватерной волны, генерируемой фемтосекундным лазерным импульсом ультрарелятивистской интенсивности в плазме.

Литература

1. Горбунов Л.М., Курсанов В.И. Возбуждение плазменных волн электромагнитными импульсами // Труды ФИАН. Т. 213. 1992. С. 54.
2. Esarey E., Schroeder C.B., Leemans W.P. Physics of laser-driven plasma-based electron accelerators // Reviews of Modern Physics. 2009. V. 81. P. 57.

УДК 533.924

Модификация поверхности частиц в плазме емкостного высокочастотного разряда

Е.А. Кононов^{1,2}, М.М. Васильев^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}

¹ Объединенный институт высоких температур РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Плазма, содержащая микрочастицы, часто встречается в природе – в космосе, в технологических процессах [1]. Частицы в плазме существенно влияют на ее свойства (распределение зарядов, поля). В свою очередь, плазма взаимодействует с объектами, контактирующими с ней – частями экспериментальной установки (электроды, стенки рабочей камеры), пылевыми частицами в ней, изменяя свойства последних.

В данной работе предметно исследованы состав и структура поверхности полимерных частиц и частиц с металлической оболочкой при их экспозиции в плазме емкостного высокочастотного разряда. При выдержке частиц в кулоновской системе на их поверхность осаждаются металлы, изменение элементного состава поверхности нелинейно по времени. На поверхности частиц меламин-формальдегида образуется металлическая островковая пленка, из которой с течением времени может образоваться сплошное покрытие. Источником материала являются электроды и другие металлические поверхности, подверженные распылению потоками ионов плазмообразующего газа низких энергий ($E \sim 100$ eV) [2].

Представлены результаты анализа поверхности и состава частиц, находящихся на электроде после выдержки в течение 6 часов. Экспериментально обнаружено, что изменяется состав и структура покрытия частиц. Частицы без покрытия, находящиеся на электродах, подвергаются эрозии, в результате чего могут образовываться игольчатые структуры из осажденных металлов на поверхности, обращенной в сторону плазмы и изменяться форма макрочастиц. У частиц с покрытием на поверхности образуются столбчатые структуры из продуктов эрозии электродов.

Таким образом, частицы в плазме емкостного высокочастотного разряда модифицируются продуктами эрозии электродов и других металлических поверхностей, контактирующих с разрядом. При

этом такая модификация приводит к приобретению частицами уникальных функциональных свойств поверхности и состава, которые можно использовать как в медицинских и промышленных целях (целевая доставка лекарств, создание порошковых основ для композитных материалов), так и в научных [3] (создание активных Янус-частиц для изучения самоорганизации в коллоидных системах).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90039.

Литература

1. Fortov, V. E.; Morfill, G.E. Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space, 1st ed.; Boca Raton: CRC Press, USA, 2009, P. 301–438.
2. Ingram, S.G.; Braithwaite, N.St.J. Ion and electron energy analysis at a surface in an RF discharge // J. Phys. D: Appl. Phys. 1988. 21. 1496–1503.
3. Arkar, K.; Vasiliev, M.M.; Petrov, O.F.; Kononov, E.A.; Trukhachev, F.M. Dynamics of Active Brownian Particles in Plasma // Molecules 2021. 26. 561.

УДК 532.529.5

Броуновское движение капель эмульсии сложного состава при воздействии лазерного излучения

Р.В. Сеношенко¹, Е.А. Кононов^{1,2}, М.М. Васильев^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}

¹Объединенный институт высоких температур РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Экспериментально наблюдалось движение монодисперсных капель эмульсии сложного состава, в которой капли масла содержали суспензию магнетита. Для получения эмульсии использовались вазелиновое масло (в качестве основы для капель) и водная суспензия магнетита, а также вода со стабилизатором в качестве среды. При помощи стенда микрофлюидики [1] были сформированы монодисперсные капли диаметром 65 мкм, образующие кластер после движения по специальным каналам.

Система капель подвергалась воздействию лазерного излучения, которое поглощалось частицами магнетита внутри капель. В результате нагрева частиц магнетита возникала термофоретическая сила, действие которой индуцировало внутрикапельное движение включений магнетита и вызывало движение самих капель эмульсии. Движение полученных эмульсий сложного состава при воздействии лазера наблюдалось с помощью стереомикроскопа. Процесс движения регистрировался высокоскоростной видеокамерой.

В процессе обработки видеоданных были получены координаты движения центра каждой капли в кластере для каждого момента времени. Были вычислены и построены зависимости от времени среднеквадратичного смещения, линейного смещения вдоль и по нормали к направлению движения капель. Также построены распределения плотности вероятности скоростей капель.

После обработки экспериментальных данных была получена зависимость среднеквадратичного смещения капель эмульсии от времени t . На интервале времени $t \leq 15$ с зависимость среднеквадратичного смещения капель пропорциональна t^2 , что может соответствовать баллистическому режиму движения, на интервале 15–50 с наблюдалась зависимость $t^{3/2}$, что может соответствовать движению в режиме супердиффузии. При $t \geq 50$ с среднеквадратичное смещение капель пропорционально t , что характерно для режима нормальной диффузии [2].

Распределение плотности вероятности по скоростям капель соответствует нормальному максвелловскому распределению. Среднее линейное смещение по нормали к направлению движения равно 55 мкм, что меньше линейного размера капель. Смещение вдоль направления движения составляет более 130 мкм, что в два раза больше размера капли и характеризует направленное движение капли. Таким образом, наблюдаемое движение капель эмульсии сложного состава при лазерном воздействии можно считать активным броуновским движением [3].

Работа выполнена за счёт средств гранта Российского научного фонда (проект № 20-12-00372).

Литература

1. Whitesides G. The origins and the future of microfluidics. Nature 442, 368–373 (2006). <https://doi.org/10.1038/nature05058>

2. *Arkar K.; Vasiliev M.M.; Petrov O.F.; Kononov E.A.; Trukhachev F.M.* Dynamics of Active Brownian Particles in Plasma. *Molecules* 2021, 26, 561. <https://doi.org/10.3390/molecules26030561>
3. *Bechinger C., Di Leonardo R., Löwen H., Reichhardt C. and Volpe G.* Active Particles in Complex and Crowded Environments // 2016 ReV. Mod. Phys. 88 045006.

УДК 533.9.03

Ионный состав плазмы вакуумной дуги на горячем катоде из CeO_2

А.Д. Мельников^{1,2}, Р.А. Усманов², В.П. Полищук², Н.Н. Антонов², А.В. Гавриков²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Данная работа посвящена экспериментальному исследованию зависимости состава плазмы вакуумной дуги на катоде из CeO_2 от напряжения, тока разряда и температуры катода. Вакуумная дуга является источником плазмы высокой производительности, одновременно позволяющим достичь высокой степени ионизации и избежать высокой доли двукратных ионов в плазменном потоке [1]. По этой причине данный тип разряда, в перспективе, может быть использован в качестве источника плазмы сепарируемых элементов для задачи плазменной переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) [2–3]. Кроме того, вакуумный дуговой разряд используется в активно развивающихся и уже традиционных технологиях: плазменных методах создания функциональных покрытий [4] и в методах создания потоков многозарядных ионов [5]. С другой стороны, до сих пор остаются пробелы в понимании физических процессов в разряде, например, в механизме ускорения ионов или создании окончательной модели катодных пятен, поэтому исследование вакуумного дугового разряда актуально и с точки зрения фундаментальной науки.

В данной работе в качестве материала катода выбран CeO_2 , т.к. он используется для моделирования процесса перевода UO_2 в плазменное состояние в рамках работ по разработке технологии плазменной сепарации ОЯТ. Диоксид церия обладает рядом теплофизических особенностей. Во-первых, испарение диоксида церия неконгруэнтно, что следует из модельной фазовой диаграммы [6]. Следствием этого является обогащение пара над CeO_2 кислородом при нагреве выше 1700 К. Во-вторых, как и у многих других оксидных соединений, электрическая проводимость диоксида церия, зависит от его стехиометрии, которая в свою очередь, зависит от температуры в силу упомянутой неконгруэнтности испарения.

Экспериментальный стенд [1] представлял собой цилиндрическую вакуумную камеру объемом $\sim 1 \text{ м}^3$. Давление остаточных газов составляло порядка 10^{-5} Па. Разряд инициировался в катодно-анодном промежутке шириной 3 см. Катод представлял собой спеченную и восстановленную до стехиометрического состава таблетку массой около 5 г. Таблетка помещалась в подогреваемый вольфрамовый тигель. Температура тигля диагностировалась яркостным пирометром. Входная диафрагма масс-спектрометра располагалась за анодом на расстоянии 0.25 м. Режим работы источника плазмы определялся током, напряжением дуги и температурой катода. В ходе экспериментов эти параметры варьировались в следующих пределах: ток дуги – 40–90 А, напряжение дуги – 10–14 В, температура катода – 2150–2300 К.

Диагностика ионного состава плазмы осуществлялась с использованием времяпролетного масс-спектрометра. Разрешающая способность масс-спектрометра равнялась 24. Использование одиночного зонда Ленгмюра позволило откалибровать масс-спектрометр по величине сигнала и определять концентрации отдельных компонент плазменного потока [1]. Регистрация масс-спектров велась непрерывно в течение эксперимента с частотой записи 13 Гц. Также велась непрерывная запись напряжения, температуры тигля и оптических спектров плазмы. Это позволило проанализировать временную эволюцию состава плазмы.

На рис. 1а представлено как менялась концентрация массового пика W^+ в течение эксперимента, в котором поддерживались неизменными ток дуги и температура тигля. Также на рис. 1а показано изменение относительного содержания материала тигля в составе плазмы. Из представленных данных видно, что доля ионов вольфрама может достигать 30%, иными словами, быть одной из основных компонент плазменной струи. Отметим, что давление паров вольфрама мало при температурах 2100–2300 К, но давление их оксидов значительно больше, т.е. материал тигля мог попасть в плазму в

результате окисления поверхности тигля [7]. На рис. 1а наблюдается тренд на снижение доли материала тигля, что может быть связано с расходом материала катода и уменьшением скорости окисления тигля.

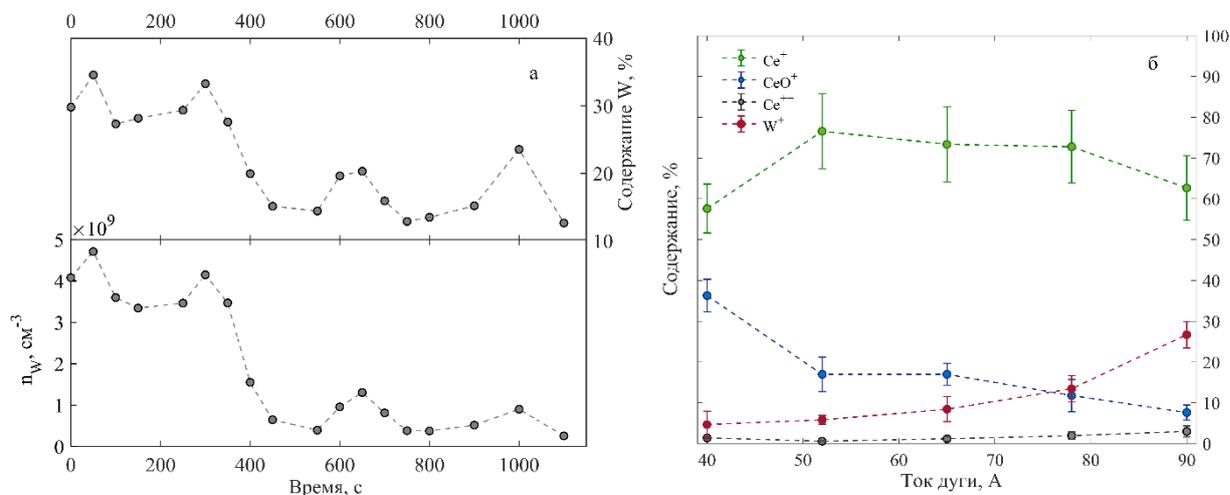


Рис. 1. а) временная эволюция содержания материала тигля в ионном составе; б) зависимость концентраций компонент плазмы от тока разряда

Исследование ионного состава плазмы выявило, что повышение напряжения дуги вызывает рост доли молекулярных ионов CeO^+ и слабый рост доли двукратных ионов Ce^{++} . Аналогичным образом влияет повышение температуры тигля. Для исследования зависимости от тока была проведена экспериментальная серия, в которой измерялся ионный состав плазмы при токах 40–90 А и постоянной температуре тигля близкой к 2270 К. Экспериментальная зависимость долей компонент плазмы от тока разряда показана на рис. 1б. Из представленных данных видно, что с увеличением тока доля молекулярных ионов падает, доля двукратных ионов почти не изменяется и растет концентрация ионов вольфрама. В составе плазмы преобладает содержание однократных ионов церия, но их доля ведет себя немонотонно. При этом ранее было показано [8], что при изменении тока разряда от 40 до 90 А температура электронов остается неизменной. Следовательно, рост тока сопровождается ростом концентрации электронов. При концентрации плазмы $n \sim 10^{11} - 10^{13} \text{ см}^{-3}$ преобладающим механизмом диссоциации является электронный удар. Следовательно, рост концентрации должен приводить к увеличению числа диссоциировавших молекул CeO . Это непосредственно и наблюдается на рис. 1б. Таким образом, было исследовано влияние основных параметров дугового вакуумного разряда на реализующийся ионный состав плазмы и показана существенная (вплоть до 30%) доля ионов материала тигля в плазменном потоке.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-72-00077, <https://rscf.ru/project/21-72-00077>.

Литература

1. Melnikov A.D. et al. Study of the Ion Composition of the Diffuse Vacuum Arc Plasma on a Hot Cathode by the Time-Of-Flight Method // Plasma Physics Reports, V. 46, N 6, P. 611–616, 2020.
2. Vorona N.A., Gavrikov A.V., Samokhin A.A., Smirnov V. P. and Khomyakov Y.S. On the possibility of reprocessing spent nuclear fuel and radioactive waste by plasma methods // Phys. At. Nucl, V. 78, № 14, P. 1624–1630, 2015.
3. Муромкин Ю. А. Долголенко Д.А. О разделении смесей химических элементов // УФН. Т. 187, № 10. 2017.
4. Liang H., Ming F., Alshareef H. Applications of Plasma in Energy Conversion and Storage Materials // Advanced Energy Materials 2018, V. 8, P. 1801804.
5. Brown I., Oks E. Vacuum Arc Ion Sources: Recent Developments and Applications // IEEE Trans. Plasma Sci, V. 33, N 6, 2005.
6. Zinkevich M., Djurovic D., and Aldinger F. Thermodynamic modelling of the cerium-oxygen system // Solid State Ionics. V. 177, № 11–12, P. 989–1001, 2006.
7. Казенас Е.К., Цветков Ю.В. / Испарение оксидов М.: Наука 1997.
8. Usmanov R.A. [et. al.] Diffuse vacuum arc on cerium dioxide hot cathode // Physics of Plasmas V. 25, P. 063524, 2018.

Колебательное движение капель масла в эмульсии вблизи границы раздела воздух–вода

В.С. Судаков¹, О.Ф. Петров^{1,2}, Е.Е. Коришнова³

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

³Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Неравновесные системы демонстрируют большое разнообразие пространственных и временных моделей, известных как диссипативные структуры (1–3). Одним из ярких примеров таких систем является активная материя, состоящая из объектов, способных двигаться за счет потребления свободной энергии, накопленной внутри объектов или полученной из внешних источников энергии. Существуют различные механизмы приведения в движение активных объектов. Они могут быть связаны с флуктуационными явлениями, внешними полями, ультразвуком, химической генерацией газовых пузырьков и потоками Марангони. Активные объекты могут двигаться в ответ на градиент в окружающей среде: хемотаксис, реотаксис, фототаксис и гравитаксис. Динамика ансамбля активных объектов демонстрирует разнообразное коллективное поведение, напоминающее живые организмы. Такие системы демонстрируют новые типы организации материалов: самоорганизованные вихри, активную турбулентность, кластеры, кристаллизацию и стеклование. Активные частицы могут двигаться как в основной массе, так и вблизи границ раздела жидкость–жидкость. В последнем случае динамика активных объектов характеризуется набором особенностей, связанных с размерностью, кривизной и симметрией. Одним из типов динамических структур является колебательное движение активных объектов, которое возникает в результате взаимодействия физико-химических процессов, диффузии и конвекции. Например, ансамбли активных капель демонстрируют довольно богатую динамику, когда реакция Белоусова–Жаботинского протекает в присутствии диффузионного переноса. Как правило, колебательное движение активных объектов на границе раздела фаз связано с взаимодействием потока Марангони с ПАВ, переносимыми диффузией и конвекцией (4).

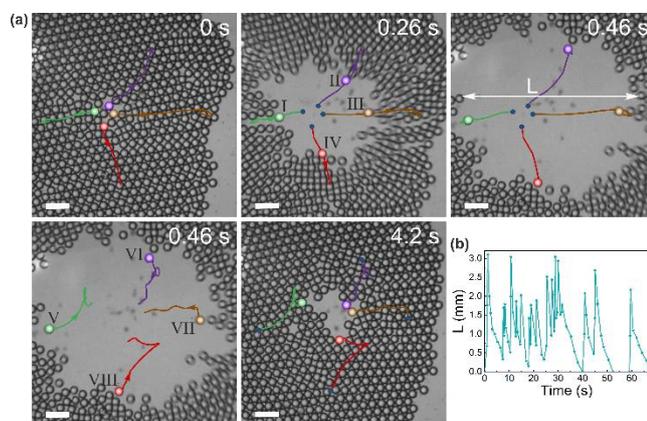


Рис. 1. (а) Последовательность фотографий, демонстрирующих процесс расширения и схлопывания трещины в кристалле. Время отсчитывается от начала стадии расширения. Цифры I–IV для соответствующих стадий расширения трещины. Цифры V–VIII соответствуют стадии обрушения трещины. Шкала 200 мкм. (б) Зависимость ширины трещины в кристалле от времени

В данной работе мы демонстрируем на примере системы, в которой наблюдается возвратно-поступательное движение капель масла в эмульсии масло-в-воде вблизи границы раздела воздух–вода. Результаты наших исследований показывают, что возвратно-поступательное движение масляных капель вблизи границы раздела воздух–вода может возникать в такой системе при выполнении набора условий. Здесь возвратно-поступательное движение возникает в результате периодического изменения направления потока Марангони на границе раздела воздух–вода. В работе мы анализируем динамику и условия для возникновения возвратно-поступательного движения капель при различном составе и доли площади поверхности капель в эмульсии (рис. 1). Существенной особенностью активной эмульсии, рассматриваемой здесь, является то, что существование возвратно-поступательного движения

тесно связано с коллективным взаимодействием капель друг с другом, и колебания вырождаются при уменьшении площади поверхности капель ниже определенного критического значения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90037.

Литература

1. *Grzybowski B.A., Fitzner K., Paczesny J., Granick S.* From Dynamic Self-Assembly to Networked Chemical Systems // *Chem. Soc. ReV.* 2017, 46, 5647–5678.
2. *Vanag V. K., Yang L., Dolnik M., Zhabotinsky A.M., Epstein I.R.* Oscillatory Cluster Patterns in a Homogeneous Chemical System with Global Feedback // *Nature* 2000, 406, 389–391.
3. *Soh S., Bishop K.J.M., Grzybowski B. A.* Dynamic Self-Assembly in Ensembles of Camphor Boats // *J. Phys. Chem. B* 2008, 112, 10848–10853.
4. *Xu Y., Takayama N., Er H., Nakata S.* Oscillatory Motion of a Camphor Object on a Surfactant Solution // *J. Phys. Chem. B* 2021, 125 (6), 1674–1679.

УДК 536.71, 536.423

Граница двухфазной области жидкость–газ по разным уравнениям состояния

К.А. Боярских^{1,2}, К.В. Хищенко^{1,2,3,4}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

³Институт проблем химической физики РАН

⁴Южно-Уральский государственный университет

Разработан алгоритм, позволяющий рассчитать границу двухфазной области (бинодаль) простого вещества, если известно термическое уравнение состояния $p(V, T)$ или задан какой-либо термодинамический потенциал в собственных переменных, например, свободная энергия в зависимости от объема и температуры $F(V, T)$. Расчеты проводились для одного моля вещества, то есть для фиксированного числа частиц.

Алгоритм построения бинодали основывается на одновременном выполнении трех условий:

$$p_L(V_L, T_L) = p_V(V_V, T_V), \quad (1)$$

$$T_L = T_V, \quad (2)$$

$$\mu_L(V_L, T_L) = \mu_V(V_V, T_V). \quad (3)$$

Здесь p_L и p_V – давления в жидкой и газовой фазах; T_L и T_V – температуры жидкой и газовой фаз; μ_L и μ_V – соответствующие химические потенциалы фаз. Из условия того, что число частиц фиксировано, равенство химических потенциалов (3) можно заменить равенством потенциалов Гиббса $G = F + pV$:

$$G_L(V_L, T_L) = G_V(V_V, T_V). \quad (4)$$

В расчетах термодинамические величины нормировались на их значения в критической точке. То есть были введены приведенная температура $\tau = T/T_c$, приведенное давление $\pi = p/p_c$ и приведенный объем $\varphi = V/V_c$.

Правильность работы алгоритма проверялась на примере хорошо изученного уравнения Ван-дер-Ваальса:

$$\left(p + \frac{a}{V^2} \right) (V - b) = RT. \quad (5)$$

Также была рассмотрена модельная задача, которая сводится к уравнению состояния заряженных твердых сфер, упомянутая в работе [1]:

$$p = \frac{nT}{1-4\eta} - \frac{1}{3}\alpha e^2 n^{4/3}, \quad (6)$$

где e – заряд электрона; α – маделунговский коэффициент; n – суммарная концентрация положительных и отрицательных ионов с зарядами $\pm e$; η – доля занятого объема. Затем рассматривалось уравнение Хольцапфеля [2]:

$$p = \frac{K_0}{K_{S_0} - 4} \left(\frac{V}{V_0} \right)^{2-K_{S_0}} \left(1 - \left(\frac{V}{V_0} \right)^{K_{S_0}-4} \right) + \frac{RT}{V} \left[1 + \sum_n a_n n B_n(T) \left(\frac{V_c}{V} \right)^n \right], \quad (7)$$

где K_0 – значение объемного модуля сжатия при нулевом давлении и нулевой температуре; K_{S_0} – значение производной модуля объемного сжатия по давлению для твердого вещества при условиях $p = 0$, $T = 0$; V_0 – объем при $p = 0$, $T = 0$; V_c – критический объем; a_n и $B_n(T)$ задаются выражениями, описанными в [2]. По уравнению (7) расчеты проводились для аргона, так как для него имелось достаточно данных, представленных в [2].

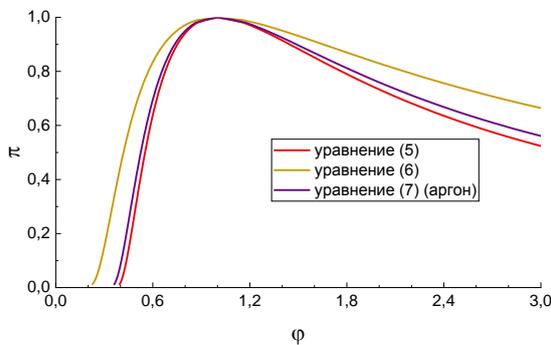


Рис. 1. Бинодали по уравнениям (5), (6) и (7) в приведенных координатах объем – давление

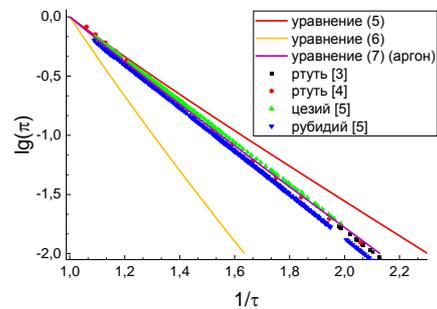


Рис. 2. Бинодали для уравнений (5), (6) и (7) и экспериментальные данные для ртути [3, 4], цезия и рубидия [5] в приведенных координатах обратная температура – логарифм давления

Результаты расчета бинодалей по уравнениям состояния (5), (6) и (7) представлены на рис. 1. На рис. 2 приведено сравнение бинодалей по уравнениям (5), (6) и (7) с экспериментальными данными для ртути [3, 4], цезия и рубидия [5]. Из анализа рис. 1 и 2 следует, что расчетные бинодали качественно согласуются друг с другом и с экспериментальными данными [3–5].

Таким образом, разработанный алгоритм позволяет рассчитать границу двухфазной области простого вещества, если задано термическое уравнение состояния или термодинамический потенциал в собственных переменных.

Литература

1. Ликальтер А.А. Критические точки конденсации в кулоновских системах // УФН. 2000. Т. 170. В. 8. С. 831–854.
2. Holzapfel W.B. Coherent thermodynamic model for solid, liquid and gas phases of elements and simple compounds in wide ranges of pressure and temperature // Solid State Sciences. 2018. V. 80. P. 31–34.
3. Шильрайн Э.Э., Никаноров Э.В. Экспериментальное исследование упругости пара ртути методом точек кипения // ТВТ. 1971. Т. 9. В. 3. С. 640–643.
4. Фокин Л.Р., Попов В.Н., Наурзаков С.П. Уравнение состояния и термодинамические свойства насыщенных и перегретых паров ртути до 1650 К и 125 МПа // ТВТ. 2011. Т. 49. В. 6. С. 862–871.
5. Чернеева Л.И., Проскурин В.Н. Экспериментальное исследование давления насыщенного пара рубидия и цезия // ТВТ. 1972. Т. 10. В. 4. С. 765–770.

Динамика уединенных янус-частиц в тлеющем разряде постоянного тока при воздействии лазерного излучения

А.С. Светлов^{1,2}, Е.А. Кононов^{1,2}, О.Ф.Петров^{1,2}, М.М.Васильев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Активное броуновское движение вызывает большой интерес как у биологов, так и у физиков. В то время как броуновские частицы находятся в тепловом равновесии с окружающей средой, активные броуновские частицы, способны поглощать энергию и преобразовывать ее в направленное движение, которое в свою очередь выводит их из состояния равновесия [1].

Представлены результаты экспериментального исследования характера движения уединенной янус-частицы при воздействии лазерного излучения различной мощности в тлеющем разряде постоянного тока. Янус-частицы представляют собой полимерные частицы с частичным металлическим покрытием. Уединенная макрочастица инжестировалась в стратифицированный тлеющий разряд постоянного тока, где, в результате баланса электрической силы и силы тяжести, наблюдалась ее левитация.

Поглощение лазерного излучения металлической поверхностью частицы приводит к её нагреву, в результате чего возникает термофоретическая сила, которая, в свою очередь, вносит вклад в движение уединенной макрочастицы. Показано, что янус-частицы в тлеющем разряде постоянного тока могут преобразовывать энергию окружающей среды (лазерное индуцирование) в кинетическую энергию движения.

Для изучения характера движения частицы подвергались воздействию лазерного излучения различной мощности. Движение частиц регистрировалось с помощью высокоскоростной видеокамеры. В результате обработки полученных экспериментальных видеоданных были получены координаты и скорости для каждого момента времени, определены кинетические энергии при различных значениях плотности мощности лазерного излучения, а также построены графики среднеквадратичного смещения от времени.

В результате анализа графиков среднеквадратичного смещения частицы и зависимости кинетической энергии от плотности мощности лазерного излучения сделан вывод, что изменение мощности воздействующего лазерного пучка приводит к изменению характера движения уединенной янус-частицы в тлеющем разряде постоянного тока. Мы экспериментально наблюдали активное броуновское движение уединенной янус-частицы [2], вызванное действием термофоретической силы, при различной интенсивности лазерного излучения.

Литература

1. *Ebbens S.J. and Howse J.R.*, 2010, In pursuit of propulsion at the nanoscale, *Soft Matter*, № 6 P. 726–38.
2. *Clemens Bechinger, Roberto Di Leonardo*. Active particles in complex and crowded environments // *ReV. Mod. Phys.*, 2016, 88, 045006 DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.88.045006>.

Высокотемпературные свойства жидкого циркония: первопринципное моделирование и интерпретация экспериментальных данных

М.А. Парамонов, Д.В. Минаков, П.Р. Левашов

Объединенный институт высоких температур РАН

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Знание высокотемпературных теплофизических свойств циркония как одного из основных конструкционных материалов ядерных энергетических установок крайне необходимо для анализа ядерной безопасности и моделирования поведения атомных реакторов при критических воздействиях. Однако его свойства в жидкой фазе до сих пор хорошо не изучены.

Интерпретация высокотемпературных экспериментов как методом импульсного нагрева, так и методом электростатической левитации затруднена из-за скорости и сложности происходящих физи-

ческих явлений, поэтому экспериментальные данные, полученные разными авторами, часто существенно различаются приблизительно [1–15]. В свою очередь, теоретическое описание циркония в конденсированном состоянии затруднено из-за сложной электронной структуры. Плотность жидкого циркония при температуре плавления, измеренная разными авторами, отличается в пределах почти 10% [1–5]. Разница в оценках наклона кривой теплового расширения почти двукратная [9, 10]. Доступны лишь несколько экспериментальных измерений для температур выше 2500 К [10, 11].

В связи с этим, в данной работе мы представляем результаты первопринципных расчетов методом квантовой молекулярной динамики (КМД), которые позволили выполнить оценку параметров критической точки циркония и положения кривой сосуществования фаз жидкость–газ и, таким образом, устранить неопределенность в знании теплофизических свойств тугоплавких металлов, особенно в жидком состоянии. Метод КМД основан на теории функционала электронной плотности (DFT – density functional theory) [16], но также учитывает движение ионов. В настоящее время в расчетах могут использоваться более 1000 атомов [17–19], что позволяет изучать неупорядоченные системы и даже фазовые переходы [17, 19]. Это делает КМД перспективным методом для описания высокотемпературных свойств циркония в широком диапазоне параметров. Для выполнения первопринципного моделирования использовался программный код VASP [20].

На основе табличного уравнения состояния, полученного в результате КМД расчетов, были восстановлены зависимости от температуры и плотности вдоль нулевой и критической изобары важных термодинамических производных, в том числе теплоемкости при постоянном объеме и постоянном давлении, коэффициента Грюнайзена, а также выполнен расчет скорости звука. По результатам данной работы отмечено отличное согласие параметров критической точки с работой Мартынюка 1984 года [12] и энтальпии плавления с последними экспериментальными данными по быстрому импульсному нагреву [10, 11] а также измерениями с помощью капельной калориметрии [13–15].

В данной работе впервые на основе первопринципных расчетов с использованием формулы Кубо–Гринвуда были исследованы транспортные и оптические свойства жидкого циркония вплоть до области критической точки. Представлено сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными в окрестности плавления. Предсказан значительный рост нормальной спектральной излучательной способности Zr для температур выше 4000 К.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (Грант № 2079-10398).

Литература

1. Peterson A. et al. Surface tension of titanium, zirconium, and hafnium // J. Appl. Phys. 1958. V. 29 (2). P. 213–216.
2. Allen B. The surface tension of liquid transition metals at their melting points // Trans. AIME 1963. V. 227.
3. Yelyutin V., Maurakh M., Penkov I. Viscosity of liquid zirconium // 1964.
4. Steinberg D. A simple relationship between the temperature dependence of the density of liquid metals and their boiling temperatures // Metall. Trans. 1974. V. 5 (6). P. 1341–1343.
5. Guillermet A. F. Critical evaluation of the thermodynamic properties of zirconium // High Temp High Press. 1987. V. 19 (2). 119–160.
6. Paradis P. F. Thermophysical properties of zirconium at high temperature // J. Mater. Res. 1999. V. 14 (9). P. 3713–3719.
7. Ishikawa T. et al. New sample levitation initiation and imaging techniques for the processing of refractory metals with an electrostatic levitator furnace // ReV. Sci. Instrum. 2001. V. 72 (5). P. 2490–2495.
8. Ishikawa T. et al. Thermophysical properties of liquid refractory metals: comparison between hard sphere model calculation and electrostatic levitation measurements // J. Chem. Phys. 2003. V. 118 (17). P. 7912–7920.
9. Yoo H. et al. Uncertainty evaluation for density measurements of molten ni, zr, nb and hf by using a containerless method // Metrologia. 2015. V. 52 (5). P. 677.
10. Korobenko V. N. Savvatimskii A. I. Temperature dependence of the density and electrical resistivity of liquid zirconium up to 4100 k // High Temp. 2001. V. 39 (4). P. 525–531.
11. Brunner C. et al. The normal spectral emissivity at a wavelength of 684.5 nm and thermophysical properties of liquid zirconium up to the end of the stable liquid phase // AIP Conf. Proc. 2003. V. 684. P. 771–776.
12. Martynyuk U. M., Karimkhodzhaev I. Estimation of critical temperatures of metals by the exploding wire method // Russ. J. Phys. Chem. 1984. V. 48. P. 722–723.
13. Rosner-Kuhn M. et al. Enthalpy measurements of the solid high-temperature β -phase of titanium and zirconium by levitation drop calorimetry // J. Alloys ComP. 2001. V. 316 (1-2). P. 175–178.
14. Kats S. A., Chekhovskoi V. Y., Kovalenko M. D. Thermophysical properties of zirconium and hafnium at high temperatures // Teplofiz. Vys. Temp. 1985. V. 23 (2) P. 395–397.
15. Yelyutin V., Maurakh M., Sverdlov G. Determining the latent heat of fusion of zirconium // IzV. Vyssh. Ucheb. Zaved., Tsvet. Met. 1967. V. 2. P. 87–88.
16. Martin R.M. Electronic structure: basic theory and practical methods. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.

17. *Hernandez E.R., Rodriguez-Prieto A., Bergara A., Alfe D.* First-Principles Simulations of Lithium Melting: Stability of the bcc Phase Close to Melting // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 104. P. 185701.
18. *Pozzo M., Desjarlais M.P., Alfe D.* Electrical and thermal conductivity of liquid sodium from first-principles calculations // *Phys. Rev. B.* 2011. V. 84. P. 054203.
19. *Pozzo M., Alfe D.* Melting curve of face-centered-cubic nickel from first-principles calculations // *Phys. Rev. B.* 2013. V. 88. P. 024111.
20. *Kresse G., Hafner J.* Ab initio molecular dynamics for liquid metals // *Phys. Rev. B.* 1993. V. 47. P. 558.

УДК 539.89

Расчет ударных адиабат сплавов металлов при высоких давлениях

Н.Н. Середкин^{1,2,3}, К.В. Хищенко^{1,3,4,5}

¹Объединенный институт высоких температур РАН

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

³Институт проблем химической физики РАН

⁴Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

⁵Южно-Уральский государственный университет

В настоящей работе мы рассчитываем ударные адиабаты для смесей и сплавов различных материалов на основе принципа аддитивности ударных адиабат компонентов [1]. Согласно этому принципу при заданном давлении ударного сжатия удельный объем ударно-сжатой смеси полагается равным сумме удельных объемов ударно-сжатых компонентов с учетом их массовой доли. Результаты такого расчета ударных адиабат сравниваются с имеющимися данными ударно-волновых экспериментов для сплавов рения с молибденом, железа с ванадием и урана с ниобием и родием при высоких плотностях энергии.

В аддитивном приближении объем ударно-сжатой смеси предполагается равным сумме объемов компонентов, полученных при том же давлении, что и при их реальном ударном сжатии в виде гомогенных монолитных образцов. Это условие выражается соотношением

$$V_{12}(p) = \alpha_1 V_1(p) + \alpha_2 V_2(p), \quad (1)$$

где p – давление; V_{12} – удельный объем смеси; V_1 и V_2 – удельные объемы легкого и тяжелого компонентов при ударном сжатии каждого из них порознь; α_1 и α_2 – их весовые концентрации ($\alpha_1 + \alpha_2 = 1$); двойной индекс 12 означает смесь. Уравнение (1) позволяет по адиабатам смеси и одного компонента найти адиабату другого компонента [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-19-00713).

Литература

1. *Алексеев Ю.Ф., Альтишлер Л.В., Крупникова В.П.* Ударное сжатие двухкомпонентных парафино-вольфрамовых смесей // *ПМТФ.* 1971, № 4. С. 152.

УДК 537.52

Моделирование электрического разряда постоянного тока в воздушном потоке

Д.А. Тарасов^{1,2}, А.А. Фирсов²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

В последние годы ведутся активные исследования по использованию электрических разрядов для воспламенения топливовоздушных смесей и стабилизации их горения в высокоскоростных потоках [1]. В данной работе было проведено моделирование электрического разряда постоянного тока в дозвуковом и сверхзвуковом течениях воздуха с различной геометрией электродов. Расчёты проведены в программном комплексе FlowVision. Моделирование течения осуществляется посредством решения трехмерной нестационарной системы уравнений Навье–Стокса с использованием модифициро-

ванной модели турбулентности k-ε FlowVision. Для моделирования электрического разряда использовалась МГД модель равновесной плазмы, а начальный токовый канал задавался вручную. В работе использовались данные о физических характеристиках воздуха из [2]. Областью их применимости является воздух при давлениях 0.01–100 атмосфер и температурах 50–60000 К, что в несколько раз больше диапазона значений, необходимого для расчётов.

Для моделирования разряда в дозвуковом потоке областью моделирования был выбран прямоугольный параллелепипед 20 см X 10 см X 10 см. Два вертикальных цилиндрических электрода диаметром 2 мм находились в ядре потока и располагались соосно, с межэлектродным расстоянием 5 мм. На граничном условии на входе задавались $P_{st} = 1$ атм, $v = 100$ м/с, $T_g = 170$ К. На выходе задавалось граничное условие свободного выхода. На поверхности электродов было задано условие прилипания скорости с использованием пристеночных функций и нулевым градиентом температуры. Граничным условием для электродов является сопряжение уравнений Максвелла на границе раздела сред. На верхний электрод подавался постоянный ток в 5 А, нижний же электрод имел постоянный потенциал 0 В. На границах области моделирования задавался постоянный нулевой потенциал. Начальными условиями устанавливались температура, скорость и давление во всём объёме, соответствующие входным граничным условиям. Начальный токовый канал задавался установкой температуры $T_g = 8000$ К в тонком цилиндре, соединяющем ближайшие концы электродов. Целью моделирования было получение трёхмерных распределений таких физических величин, как температуры и плотности тока во время эволюции разряда в потоке. Также, для дозвуковой задачи был смоделирован перепробой между частями канала на 340 мкс. Полученные результаты видно на рис. 1.

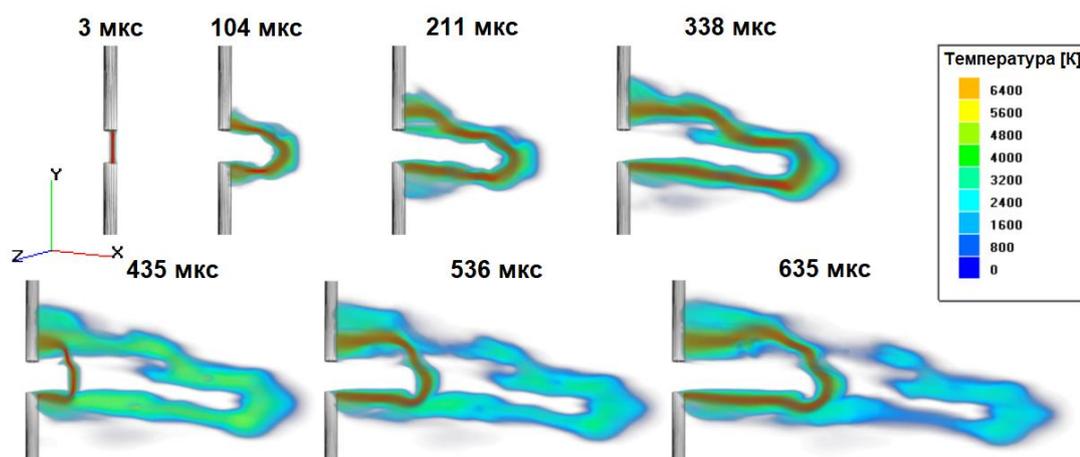


Рис. 1. Эволюция электрического разряда во времени. Показано трёхмерное распределение температуры с наложенным поверх распределением тока (красным цветом)

Моделирование разряда в сверхзвуковом потоке производилось в пристеночной области течения. В качестве расчётной области использовался прямоугольный параллелепипед размерами 100 мм X 31 мм X 37 мм, содержащий в себе цилиндрические электроды диаметром 1.5 мм. Электроды расположены в стенке, не выступая из неё. Расстояние между ними – 4 мм. Выход из расчётной зоны – свободный, на стенке с электродами задано граничное условие с использованием пристеночных функций и внешним теплообменом. На остальных стенках установлено условие симметрии, обеспечивающее нулевой градиент физических величин по нормали к границе. В качестве граничного условия для входа использовался сверхзвуковой вход с заданием температуры, распределения скорости и статического давления. На входе задавались $P_{st} = 22000$ Па, $v = v(y)$ где y – расстояние от стенки, $T_g = 170$ К. Для определения профиля скорости с учётом пограничного слоя был проведён предварительный расчёт для тонкого двумерного слоя воздуха в параллелепипеде длиной 200 мм, что соответствовало геометрии экспериментальной установки. Число Маха в ядре равнялось 2. Целью моделирования было получение трёхмерных распределений температуры и плотности тока в процессе эволюции разряда в потоке. Полученные результаты представлены на рис. 2. На рис. 3 представлены распределения температуры и плотности тока вблизи поверхности стенки, которые наглядно показывают, что токовый канал существенно меньше температурного.

Работа выполняется при поддержке гранта РФФИ № 21-79-10408.

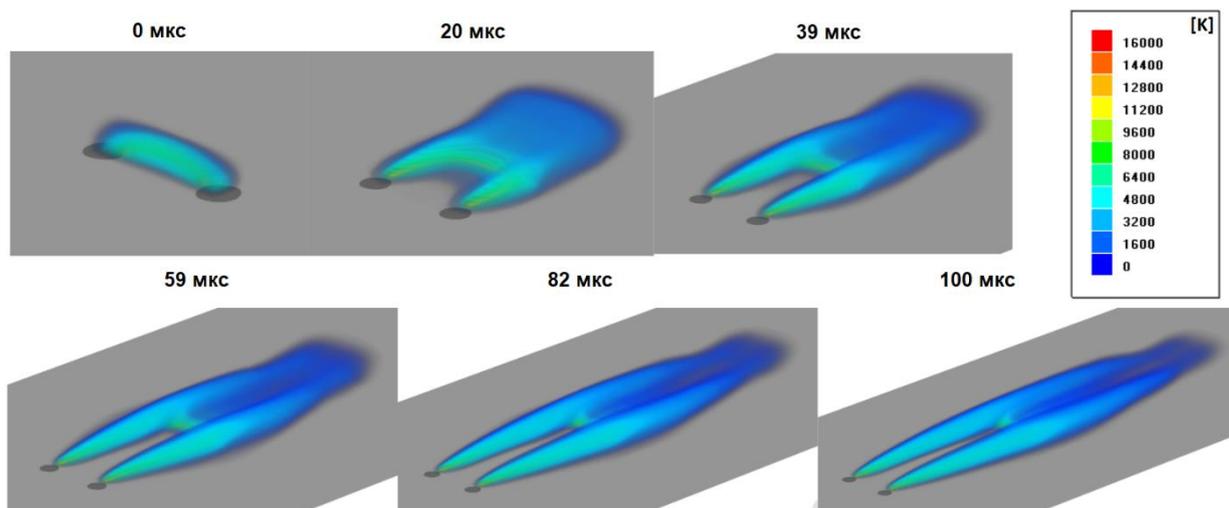


Рис. 2. Эволюция электрического разряда во времени. Показано трёхмерное распределение температуры

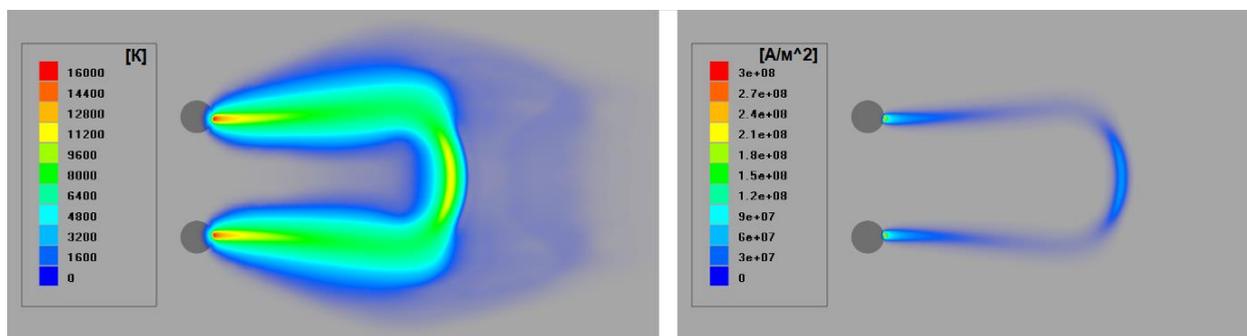


Рис. 3. Температура (слева) и плотность тока (справа) дугового разряда в сечении вблизи стенки

Литература

1. Leonov S.B. Electrically Driven Supersonic Combustion // *Energies*. 2018. V. 11(7). P. 1733.
2. D'Angola A. et al. Thermodynamic and transport properties in equilibrium air plasmas in a wide pressure and temperature range // *The European Physical Journal D*. 2008. V. 46. P. 129–150.

УДК 533.9.01

Особенности взаимодействия пылевых частиц в газовом разряде

Э.А. Саметов, Е.А. Лисин, Е.А. Кононов, О.С. Ваулина, М.М. Васильев, О.Ф. Петров

Объединённый институт высоких температур РАН

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Полученные ранее результаты расчетов для смеси тяжелого легко ионизируемого газа (в том числе и паров тяжелых металлов – ртути, цезия и т.д.) спрогнозировали сильное влияние состава газа на характеристики плазменно-пылевых структур в разрядах [1]. А именно изменение тех особенностей, которые обусловлены сверхзвуковым характером течения: конус Маха, анизотропию взаимодействия пылинок и т.д. В частности, результаты численного моделирования показали, что разряд в гелии с добавкой незначительного количества тяжелого газа (например, криптона, ксенона) или паров металлов с большим атомным весом может позволить получить резкое изменение характеристик ионного потока, и следует ожидать, соответственно, значительного изменения свойств пылевых структур в таком разряде. В частности, это может приводить к изменениям в свойствах взаимодействия макрочастиц, например, к так называемому «нарушению» симметрии взаимодействия. Эффект фокусировки ионов в кильватерном следе, возникающем за макрочастицей при возмущении направленного ионного по-

тока, приводит к тому, что пылевая частица испытывает электростатическое отталкивание от одноименно заряженных соседних частиц и эффективное притяжение к их следам (ионным фокусам). В результате нарушается симметрия эффективного взаимодействия между пылевыми частицами.

В свою очередь нарушение симметрии может привести к экспериментально наблюдаемой особенностям лабораторной пылевой плазмы – высокой кинетической энергии макрочастиц по сравнению с температурами нейтральной, ионной и электронной подсистем. Это явление называют «аномальным разогревом» пылевых частиц. Основные механизмы «аномального разогрева» пыли обычно связываются с различными временными и/или пространственными изменениями их зарядов, вызванными, например, случайной природой ионных и электронных токов, заряжающих пылевые частицы, или стохастическим движением пыли в объеме пространственно-неоднородной плазмы. Поскольку заряд пылевой частицы определяется локальными параметрами плазмы в ее окрестности, мощность источников подкачки энергии, а соответственно, и «кинетическая температура» частиц могут существенно изменяться в пространстве. Источниками неравномерного нагрева системы частиц также могут являться неоднородное распределение температуры окружающего газа, лазерное излучение, используемое для диагностики, протекание химических реакций и т. д. Однако эти модели не объясняют некоторых особенностей перераспределения тепловой энергии в наблюдаемых пылевых структурах, таких как, например, увеличение (или уменьшение) кинетической температуры макрочастиц в направлении потока ионов и неравновесное распределение тепловой энергии между степенями свободы. В работе [2] был теоретически описан механизм кинетического разогрева частиц и перераспределения их кинетической энергии для дисперсных систем разной природы за счет работы эффективных сил межчастичного взаимодействия.

В рамках данной работы были проведены и проанализированы эксперименты в слабоионизованной газовой смеси с ионным потоком в плазме газового разряда постоянного тока при напряжении 2,46 кВ, силе тока 1 мА и давлении 50 Па. В качестве легкоионизируемой примеси тяжелых атомов использовался инертный газ криптон (Kr). В ходе эксперимента молярное количество примеси в газовой смеси варьировалось в промежутке от 0 до 2.4% от общего. Результаты измерения производных сил взаимодействия между пылевыми частицами с помощью метода, описанного в работе [3], показали, что симметрия межчастичного взаимодействия значительно нарушена. При наличии в гелии не более 1% примеси криптона производные сил межчастичного взаимодействия имеют разные знаки, при этом производная силы, с которой верхняя частица действует на нижнюю в поперечном (горизонтальном) направлении, отрицательна. Это говорит о доминирующем притяжении нижней частицы к верхней. Если количество примеси тяжелого газа превышает 1%, то обе производные положительны, и взаимодействие между частицами имеет исключительно отталкивающий характер, при этом по-прежнему является невзаимным. При добавлении примеси криптона в гелий (от 0 до 2.4%) изменения производной силы, действующей на верхнюю (по потоку ионов) частицу со стороны электрического поля разряда, оказались в пределах 6% при погрешности измерений $\pm 5\%$. При этом отношение производных внешних сил с увеличением примеси до 2.4% изменилось более чем на 30%. Это факт свидетельствует о значительном влиянии примеси на заряд нижней частицы, находящейся в кильватерном следе верхней частицы.

Также были проанализированы результаты эксперимента по изучению механизма кинетического разогрева пылевых частиц в газоразрядной плазме. Эксперимент проводился в плазме газового разряда постоянного тока при давлении 0.015 Торр и различной силе тока разряда (от 0.75 мА до 2.05 мА). Далее с помощью трех независимых способов была определена эффективная температура теплового источника стохастического движения частиц (как мера случайных процессов, действующих в системе независимо от сил межчастичного взаимодействия). Была определена величина дополнительно подкачиваемой энергии в систему за счет работы эффективных сил межчастичного взаимодействия. Таким образом, была проведена экспериментальная проверка предложенной в работе [2] модели кинетического разогрева системы из двух взаимодействующих частиц.

В данной работе было впервые экспериментально показано, что наличие в плазме легкого газа небольшой доли примеси тяжелых ионов значительно влияет на структуру кильватерного следа, возникающего при возмущении ионного потока макрочастицей. В частности, впервые наблюдался переход от эффективного притяжения одноименно заряженных макрочастиц в разряде постоянного тока (за счет кильватерного взаимодействия) к взаимному отталкиванию между частицами (при добавлении $\sim 1\%$ легкоионизируемой примеси). Также была экспериментально проверена разработанная ранее модель кинетического разогрева системы из двух взаимодействующих частиц. Было показано, что доминирующим механизмом разогрева пылевых частиц в плазме газового разряда с ионным потоком действительно является работа эффективных сил межчастичного взаимодействия.

Данная работа была поддержана Российским Научным Фондом (грант № 19-12-00354).

Литература

1. Майоров С.А. О дрейфе ионов в газе во внешнем электрическом поле // Физика плазмы. 2009. Т. 35, № 9. С. 869.
2. Vaulina O.S., Lisina I.I., Lisin E.A. Kinetic energy in a system of particles with a nonreciprocal interaction // EPL (Europhysics Letters). 2015. Т. 111. № 5. С. 50003.
3. Lisin E.A. et al. Experimental study of the nonreciprocal effective interactions between microparticles in an anisotropic plasma // Scientific Reports. 2020. Т. 10. № 1. С. 1–12.

ДК 53.092

Структура ударной волны в никеле с наноразмерными порами при 1.7 и 4.1 ГПа

Т.А. Ростил¹, В.С. Зиборов¹, А.Ю. Долгобородов^{1,2}, М.Л. Кусков²

¹Объединённый институт высоких температур РАН

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН

В экспериментах по одноосному ударному сжатию исследована структура ударной волны в образцах из никеля с наноразмерными порами (pnNi). Покоящиеся образцы нагружались в результате соударения с плоскими ударниками, разогнанными до необходимой скорости на метательной установке Стрела-2М (ОИВТ РАН).

Работа выполнена в рамках исследования ударно-волновых свойств реакционноспособных смесей нано- и микрочастиц никеля и алюминия [1, 2]. В указанных публикациях рассмотрена возможность протекания химической реакции образования интерметаллида алюминида никеля $\text{Al}+\text{Ni}\rightarrow\text{NiAl}$ за фронтом ударной волны. Показано, что в диапазоне давления до 60 ГПа скорость звука в ударно-сжатых нанодисперсных смесях этих металлов была выше, чем в микродисперсных. Для подробного анализа этой особенности необходимо знать ударно-волновые свойства компонентов смесей в широком диапазоне давлений.

Образцы изготавливались путем прессования наночастиц никеля со средним размером ~ 50 нм в атмосфере аргона. При попадании в воздушную атмосферу образцы окислялись кислородом; через 24 ч нахождения в ней их масса увеличивалась на 2%, после чего не изменялась. Плотность исследованных образцов составила 4.72 г/см³, они имели дискообразную форму с толщиной и диаметром 2.1 и 30 мм, соответственно (рис. 1а). Форма частиц и наноструктура материала изображена на рис. 1б.

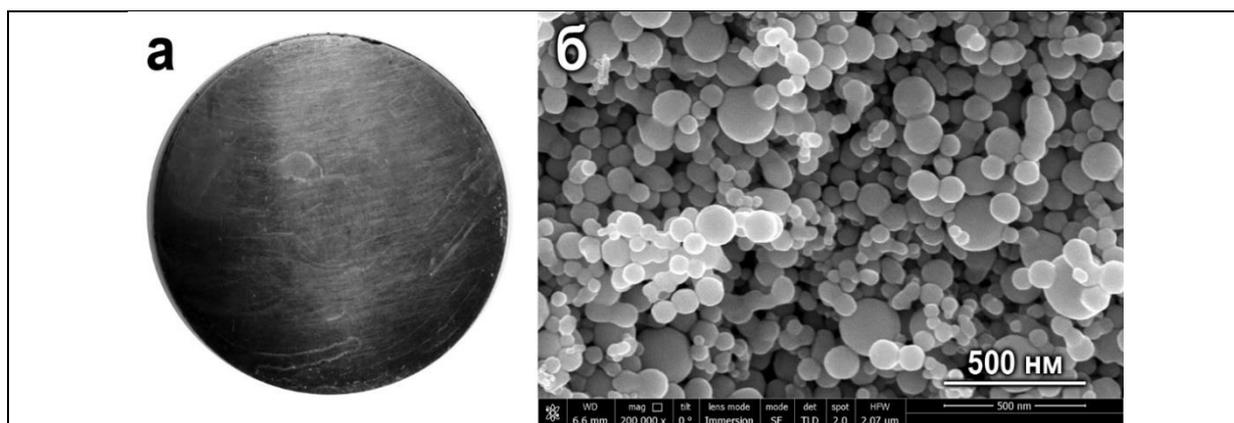


Рис. 1. Фото образца (а) и наноструктура прессованного порошка из наночастиц никеля (б)

В экспериментах с помощью метода лазерной интерферометрии VISAR [3] регистрировалось изменение скорости тыльной поверхности образца после выхода на нее ударной волны. Тыльная поверхность образца закрывалась тонкой алюминиевой фольгой (~ 7 мкм), и находилась в контакте с водяным окном. Полученные профили скорости (рис. 2) имеют ступенчатый характер, связанный расщеплением ударной волны, входящей в pnNi, на более быструю волну-предвестник, связанную со способностью пор выдерживать определенные динамические нагрузки не разрушаясь, и пластическую ударную волну, в которой происходит полное или частичное закрытие пор [4, 5].

Скорость волны-предвестника практически не меняется с ростом давления нагружения от 1.7 до 4.1 ГПа и составляет около 2.5 км/с, а скорость пластической волны возрастает от 1.2 до 1.4 км/с. Полученные данные позволили определить динамический предел упругости при сжатии пористого наноразмерного никеля: $\sigma_{HEL} = 0.48$ ГПа. Волнообразная структура фронта ударной волны в pnNi, наиболее отчетливо наблюдаемая в эксперименте 1 при 1.7 ГПа (рис. 2), объясняется многократными реверберациями предвестника между исследуемой поверхностью и надвигающимся фронтом ударной волны.

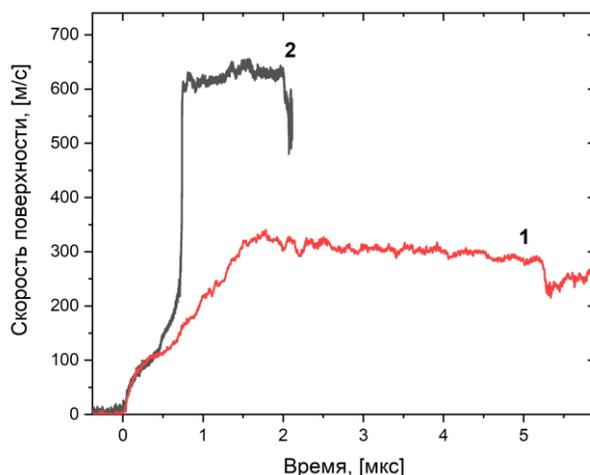


Рис. 2. Профили скорости поверхности образец pnNi – водяное окно (профили ударных волн) при нагружении 1.7 ГПа (№ 1) и 4.1 ГПа (№ 2)

Литература

1. Якушев В.В., Ананьев С.Ю., Уткин А.В., Жуков А.Н., Долгобородов А.Ю. Ударная сжимаемость смесей микро- и наноразмерных порошков никеля и алюминия // ФГВ. 2018. Т. 54, № 5. С. 45–50.
2. Якушев В.В., Ананьев С.Ю., Уткин А.В., Жуков А.Н., Долгобородов А.Ю. Скорость звука в ударно-сжатых образцах из смеси микро- и нанодисперсных порошков никеля и алюминия // ФГВ. 2019. Т. 55, № 6. С. 108–114.
3. Barker L.M., Hollenbach R.E. Laser interferometer for measuring high velocities of any reflecting surface // J. Appl. Phys. 1972. V. 43. P. 4669.
4. Linde R.K., Seaman L., Schmidt D.N. Shock Response of porous copper, iron, tungsten, and polyurethane // J. Appl. Phys. 1972. V. 43, № 8. P. 3367–3375.
5. Butcher V.M., Karnes C.H. Dynamic compaction of Porous Iron // J. Appl. Phys. 1969. V. 40, № 7. P. 2967–2976.

УДК 533.924

Формирование микрочастиц в плазме тлеющего разряда постоянного тока

Ефименко Д.Б.^{1,2}, Кононов Е.А.^{1,2}, Васильев М.М.^{1,2}, Петров О.Ф.^{1,2}

¹ Объединенный институт высоких температур РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Представлены результаты экспериментального исследования распыления полимерной вставки в плазме тлеющего разряда постоянного тока. Эксперимент проводился в вертикальной стеклянной трубке с аксиально расположенной полимерной вставкой с сужением в верхней части. Для визуализации процесса формирования нано и микрочастиц применялась лазерная подсветка через плоское оптическое окно в торце трубки. В качестве плазмообразующего газа использовался аргон при давлении 0,11 торр.

Распыление вставки происходит в ее сужении, в месте концентрации плазмы и ее контакта с материалом вставки. После включения разряда в течение нескольких секунд видны лишь восходящие потоки частиц, при этом выделить отдельные частицы не представляется возможным – это частицы субмикронной фракции. Через временной промежуток ~100 с образуется структура с хорошо различимыми

мыми частицами, что свидетельствует об агломерации и росте частиц. Есть два механизма роста частиц: первый - осаждение распылённых атомов и кластеров, второй - из-за слипания крупных наночастиц.

Сбор образованных частиц осуществлялся в пяти точках с помощью алюминиевых пластинок с закрепленным на них углеродным скотчем. Одна из пластинок прикреплялась ко дну трубки для сбора частиц после выключения разряда, одна в нижнем ответвлении к электроду, для сбора частиц, летящих к электроду, одна прямо напротив электрода, одна с внутренней стороны конуса вставки, для сбора субмикронной фракции, и одна с внешней стороны конуса, также для сбора частиц после выключения разряда. Полученные образцы были исследованы методом растрово-электронной микроскопии. На извлеченных образцах преимущественно присутствуют две фракции – сферические частицы диаметром 250-350 нм. и их агломераты диаметром до 1 мкм.

Дальнейшая работа будет посвящена определению зависимости размера образующихся макро-частиц от времени экспозиции распыленной полимерной фракции в плазме.

Литература

1. R.E. Boltnev, E.A. Kononov, F.M. Trukhachev, M.M. Vasiliev, O.F. Petrov, Synthesis of nanoclusters and quasy one-dimensional structures in glow discharge at $T \approx 2$ K, Plasma Sources Science and Technology, 2020.
2. Дж. Голдстейна и Х. Яковица, ред. Практическая растровая электронная микроскопия. М.: Мир, 1978.

УДК 533.9.082

Моделирование системы ускоряющих электродов для времяпролетного масс-анализатора

Д.Е. Мионов^{1,2}, А.Д. Мельников^{1,2}, Р.А. Усманов^{1,2}, А.В. Гавриков^{1,2}

Объединенный институт высоких температур РАН

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Целью данной работы являлось усовершенствование системы ускоряющих электродов для времяпролетного масс-анализатора. Метод плазменной сепарации разрабатывается для решения проблемы утилизации отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) [1]. Он подразумевает перевод ОЯТ в состояние плазменного потока, который в некоторой конфигурации электромагнитного поля может быть разделен на составляющие его актиноиды и продукты распада. Для выделения актиноидов вещество в потоке плазмы должно быть полностью ионизировано, притом ионы должны иметь одинаковый заряд. Времяпролетная масс-спектрометрия применяется в поиске оптимальных режимов работы вакуумного дугового разряда, коими для задач плазменной сепарации являются степень ионизации и заряды ионов.

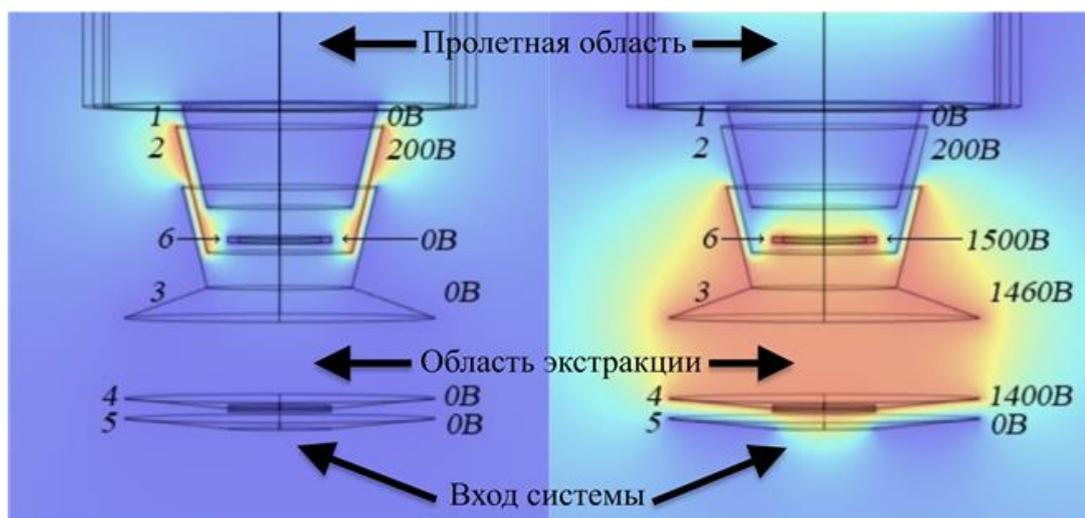


Рис. 1. Рассчитанное распределение электрического потенциала в двух фазах: слева – в первой, справа – во второй. Схема системы и потенциалы на электродах

На данном этапе анализируется ионный состав плазмы при помощи времяпролетного масс-спектрометра [2]. В существующей схеме для создания однородного поля используются сеточные электроды, вследствие чего пропускная способность системы мала, выходной сигнал меньше 1 В.

Для увеличения выходного сигнала масс-анализатора было предложено убрать из системы как можно больше сеточных электродов и, работая над геометрией системы, сохранить распределение потенциала в ускоряющей области (далее – область экстракции).

Получив пучок частиц с одной и той же величиной энергии, можно анализировать состав пучка ввиду того, что время пролета масс-анализатора частицами разной массы различно [3]. Для формирования пучка используется система экстракции, она состоит из пяти электродов (рис. 1). Процесс создания квазимоноэнергетического пучка условно делится на две фазы. На вход системы (электрод № 5) приходит плазма, в первой фазе отбрасываются электроны, а ионы собираются в области экстракции – между электродами № 3 и № 4. Для первой фазы важно, чтобы ионы не попали в пролетную область до начала следующей фазы – необходимо создать в сечении третьего электрода потенциал, превышающий 10 В (экспериментальная оценка средней энергии ионов в плазме). В следующей фазе на третий и четвертый электроды подается ускоряющий импульс длительностью 1.5 мкс [2]. При однородном поле в области экстракции получается квазимоноэнергетический пучок.

В ходе исследования было показано, что увеличить пропускание системы можно, заменив часть электродов на конические (точнее – электродов в виде усеченных конусов) и добавив в систему кольцевой электрод № 6, выравнивающий потенциальную яму во второй фазе. Поставленная задача решалась с помощью моделирования в Comsol Multiphysics. Варьируя существенные параметры конических электродов (диаметры оснований усеченного конуса, высота, потенциалы на электродах), было получено приближенное к требуемому распределению потенциала (модуль Electrostatics). Поскольку необходимо разрешить ионы металлов и их оксидов, отличающиеся по массе на 16 а.е.м., на масс-спектре, требуется разрешить сигналы, отстоящие друг от друга по времени не менее, чем на 1 мкс. Таким образом, большая часть прилетающих частиц одной массы должна прилететь в конец пролетной области за промежуток времени, не превышающий 1 мкс. Проведено моделирование пролета частиц атомной массой в 140 а.е.м, через масс-спектрометр. Выбор такой атомной массы обусловлен величиной атомной массы церия, диоксид которого используется как модель диоксида урана в экспериментах [4]. Для проверки работоспособности системы в Comsol Multiphysics была построена модель масс-анализатора и проведено моделирование (модуль Charged Particle Tracing, не учитывалось взаимодействие частиц между собой; не учитывалось распределение направлений скоростей частиц, попадающих в область экстракции) пролета 900 частиц, попавших в область экстракции, через систему. Для электродов с описанными в работе параметрами, получен коэффициент пропускания, равный 0.33. Таким образом, он был увеличен практически в 4 раза (ранее – 0.08).

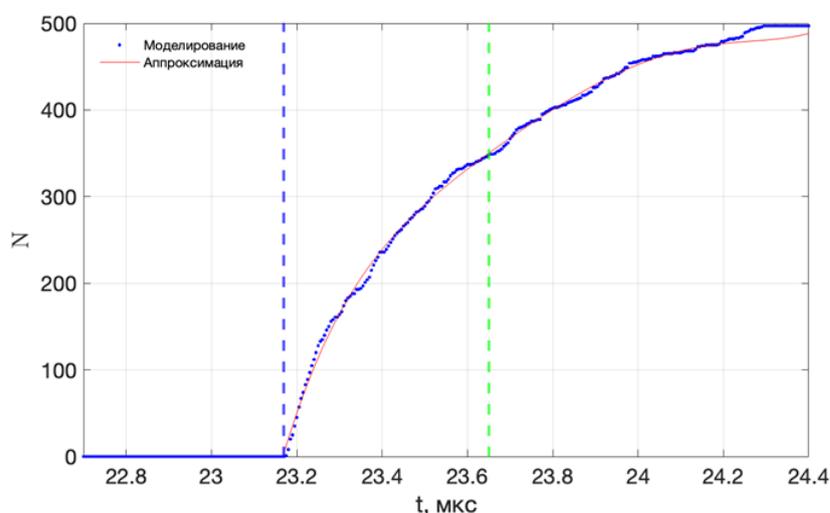


Рис. 2. Количество достигших конца пролетной области частиц от времени. Синий и зеленый пунктиры – моменты времени, в которые конца пролетной области достигают первая частица и 0.68 от общего числа долетевших частиц. Расстояние между пунктирами: $dt = 450$ н

Моделирование показало, что в разработанной системе ширина массового пика при временной развертке сигнала не превышает 450 нс (рис. 2), что соответствует требованию о разрешении сигналов от металлов и их оксидов. При моделировании пролета через масс-анализатор на границах области

дрейфа осело меньше половины попавших в пролетную область ионов. Стоит отметить, что контроль над пучком в области дрейфа возможен с помощью электрооптических линз [5]. В результате работы была найдена конфигурация системы ускоряющих электродов конической формы с коэффициентом пропускания в 4 раза больше, чем у системы с плоскими электродами, и позволяющая обеспечить необходимое разрешение масс-спектрометра.

Литература

1. Vorona N.A., Gavrikov A.V., Samokhin A.A., Smirnov V. P., and. Khomyakov Y.S. On the possibility of reprocessing spent nuclear fuel and radioactive waste by plasma methods // Phys. At. Nucl, V. 78, N 14. P. 1624–1630, 2015.
2. Мельников А. Д. [и др.]. Исследование зарядового состава плазмы диффузной вакуумной дуги на горячем катоде времяпролетным методом // Физика плазмы. 2020. Т. 46, № 6. С. 510–515.
3. Cotter R. J. Time-of-Flight Mass Spectrometry // ACS Symposium Series; American Chemical Society: Washington, DC, 1993.
4. Usmanov R. A. et al. Diffuse vacuum arc on cerium dioxide hot cathode // Physics of Plasmas. 2018. V. 25, N 6. P. 063524
5. Klempner O., Barnett M. E. Electron optics // Electron Optics. 2011.

УДК 537.523

Экспериментальное исследование электрических характеристик импульсного поверхностного барьерного разряда

С.А. Фортальнов¹, В.В. Воеводин^{1,2}

¹»Национальный исследовательский университет «Московский энергетический институт»

²Институт электрофизики и электроэнергетики РАН

Широкое применение как импульсной высоковольтной техники, так и технологий с применением импульсного барьерного разряда, обуславливают необходимость исследования его основных электрических характеристик – напряжения зажигания разряда U_0 , амплитуды тока разряда I_m и ширины разрядной зоны L , от параметров питающего напряжения [1]. Цель работы состояла в проведении экспериментального исследования подобных зависимостей для импульсного поверхностного барьерного разряда (ПБР) в воздухе атмосферного давления при нормальных условиях.

Электродная система в работе представляла собой барьер из керамики ХС22, с одной стороны которого располагалась узкая медная полоса длиной 30 мм, к которой прилагалось высокое напряжение (коронирующий электрод), а с обратной стороны – широкая заземленная медная пластина (обратный электрод) с залитыми эпоксидной смолой краями, состоящая из трех сегментов. Центральный сегмент шириной 1 см использовался для проведения токовых измерений. Подобная система известна в литературе как *плоский актуатор*, и используется для управления электрогидродинамическими потоками. Для создания разряда использовалось высокое импульсное периодическое напряжение с частотой следования 5 кГц, амплитудой $U_m = \pm 6 \div 9$ кВ униполярных прямоугольных импульсов, формируемое с помощью генератора, разработанного в ИЭЭ РАН [2]. Длительность фронта и спада импульсов составляла 150 нс, длительность импульса 1 мкс. Для измерения высокого напряжения использовался делитель Tektronix P6015A, для измерения тока ПБР применялся малоиндуктивный токовый датчик – резистивный аттенюатор Д2-32. Сигналы с измерительных элементов регистрировались с помощью осциллографа LeCroy 104Xi-A с полосой пропускания 500 МГц. В каждом опыте записывалось не менее 100 осциллограмм, дальнейшая их обработка производилась с помощью пакета MATLAB. Определение ширины разрядной зоны производилось фотографическим методом с помощью камеры Canon EOS 600D (выдержка 1 с, ISO 400–1000, 60 пикс/мм).

Было установлено, что при использованных в работе параметрах импульсного напряжения, ПБР зажигается только на фронте и на спаде импульса. При этом разряд на фронте положительного и на спаде отрицательного импульса имеет положительную полярность, а на фронте отрицательного и на спаде положительного импульса – отрицательную полярность, что выражается в различиях в амплитуде тока разряда и напряжениях зажигания.

Напряжение зажигания ПБР определялось по моменту появления разрядного тока на получаемых осциллограммах. При положительной полярности подаваемого напряжения U_0 оказалось в 2,2 раза ниже, чем при отрицательной полярности при скорости нарастания напряжения 110 В/нс.

С увеличением амплитуды импульсов возрастала и скорость нарастания напряжения, выдаваемого генератором, при этом разрядные напряжения для обеих полярностей становились близкими по значению, их соотношение снижалось до 1,13 при скорости нарастания напряжения 135 В/нс.

При этом амплитуда тока разряда ПБР оказалась в 1,7–2,7 раз больше при положительной полярности разряда, чем при отрицательной полярности, что могло быть связано со стримерным характером развития разряда при положительной полярности напряжения.

Длина разрядной зоны зависела от амплитуды приложенного напряжения. При этом при положительной полярности импульса длина разрядной зоны практически в 2 раза превышала такую же при отрицательных импульсах.

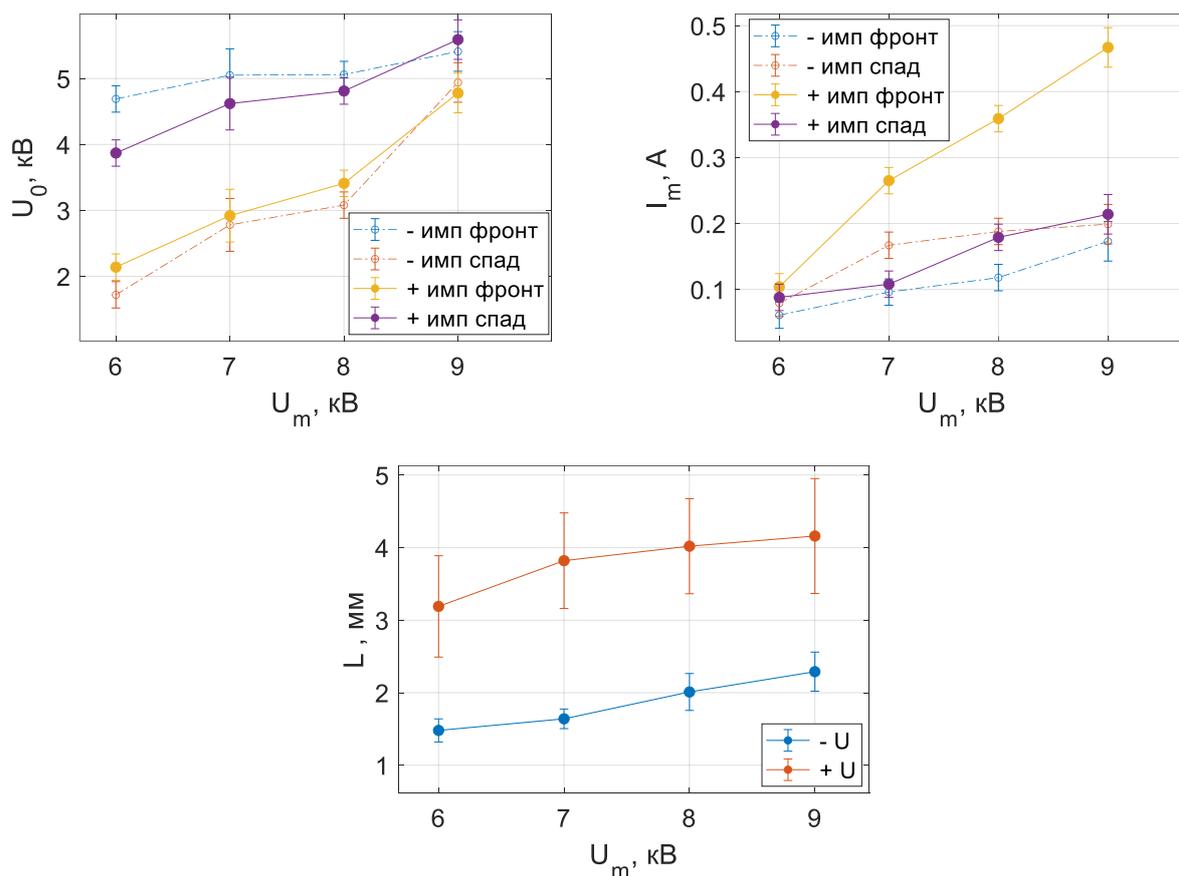


Рис. 1. Зависимости напряжения зажигания U_0 , амплитуды тока разряда I_m и ширины разрядной зоны L от амплитуды импульсов напряжения U_m при различной их полярности для фронта и спада прямоугольного импульса напряжения

Литература

1. Соколова М.В. [и др.]. Поверхностный электрический разряд в электротехнологических устройствах и в изоляционных конструкциях: учебное пособие. М.: Издательство МЭИ, 2018, 126 с.
2. Малашин М.В. [и др.]. Полупроводниковый генератор высоковольтных прямоугольных импульсов для питания барьерного разряда // Приборы и техника эксперимента. 2016, № 2. с. 71–75.

Экспериментальное исследование взаимодействия между янус-частицами в приэлектродном слое ВЧ-разряда

Е.А. Лисин^{1,2}, Е.А. Кононов^{1,2}, М.М. Васильев^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}

¹ Объединённый институт высоких температур РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Экспериментальное исследование взаимодействия между *янус-частицами* было проведено в квазидвумерных плазменно-пылевых системах, образующихся в приэлектродном слое емкостного высокочастотного (ВЧ) газового разряда. В качестве плазмообразующего газа использовался аргон при давлении 5.8 Па. В качестве пылевой компоненты использовались частицы округлой формы диаметром 10 мкм из меламин-формальдегида, частично покрытые железом (так называемые *янус-частицы*). Для визуализации и воздействия полученная структура подсвечивалась пучком аргонового газоразрядного лазера различной мощности, сформированным в «лазерный нож». В ходе эксперимента интенсивность лазерного излучения изменялась в диапазоне от 0.1 до 4 Вт. Для восстановления пространственного распределения сил взаимодействия между пылевыми частицами в квазидвумерных системах был использован метод, основанный на решении обратной задачи Ланжевена [1, 2]. Критерием правильного восстановления является совпадение результатов, полученных с использованием разных аппроксимаций.

Было обнаружено, что при всех значениях мощности лазерного излучения янус-частицы на расстоянии равном одному среднему межчастичному взаимно отталкиваются друг от друга, в то время как на больших расстояниях возникает эффективное взаимное притяжение. Отметим, что при всех значениях мощности лазерного излучения частота электростатической ловушки, удерживающей одноименно заряженные пылевые частицы от разлета, оказалась равной $0.95 \pm 0.03 \text{ с}^{-1}$. Также было обнаружено уменьшение эффективного коэффициента трения частиц с ростом интенсивности лазерного воздействия, что может быть обусловлено появлением возрастающей фотофоретической силы, вызванной неравномерным нагревом поверхности частиц [3].

Данная работа была поддержана Российским Научным Фондом (грант № 20-12-00372).

Литература

1. *Vaulina O.S., Lisin E.A., Gavrikov A.V., Petrov O.F. and Fortov V. E.*, Determination of pair interaction forces between particles in nonideal dissipative systems // *Physical review letters*. 2009. V. 103, N 3. P. 035003.
2. *Vaulina O.S., Lisin E.A., Gavrikov A.V., Petrov O.F. and Fortov V. E.*, Analysis of pair interparticle interaction in nonideal dissipative systems // *Journal of Experimental and Theoretical physics*. 2010. V. 110, N 4. P. 662-674.
3. *Nosenko V., Luoni F., Kaouk A., Rubin-Zuzic M. and Thomas H.*, Active Janus particles in a complex plasma // *Physical Review Research*. 2020. V. 2, N 3. P. 033226.

Расчет потенциальных кривых межатомного взаимодействия и термодинамических свойств ArN^+

М.А. Мальцев^{1,2}, И.В. Морозов^{1,2}, С.А. Аксенова^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Объединённый институт высоких температур РАН

Масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой (ИСП) [1] является одним из наиболее чувствительных методов атомного анализа вследствие эффективности и надежности ИСП как источника атомных ионов. Чаще всего в качестве буферного газа для генерируемой плазмы выбирают аргон, так как он химически инертен, что сводит к минимуму образование нежелательных молекулярных ионов при атомном анализе. Однако, учитывая высокую плотность аргона в ИСП, даже небольшая доля соединений Ar с другими компонентами плазмы (водород, кислород и др.), а также с ионами металлов M^+ из элементов матрицы может существенно влиять на получаемые масс-спектры, перекрывая сигналы от исследуемых веществ [2].

Одним из распространенных в ИСП соединений аргона (аргидов) является положительно заряженный нитрид аргона (ArN^+). Для количественной оценки распространенности данного аргидов в равновесной ИСП необходимы данные о его термодинамических свойствах. Расчет термодинамических функций двухатомных молекул традиционно основан на использовании молекулярных постоянных. Однако этот метод можно усовершенствовать, используя потенциал межатомного взаимодействия, полученный квантово-химическими методами [3–5].

В данной работе были проведены квантово-химические расчеты методом MRCI с учетом спин-орбитального и спин-спинового взаимодействия. Были получены потенциальные кривые межатомного взаимодействия для низлежащих триплетных и синглетных электронных состояний. Рассчитанные потенциальные кривые были сравнены с другими расчетными методами [6]. На основе полученных кривых были рассчитаны основные температурные зависимости термодинамических функций положительно заряженного нитрида аргона. Проведены оценки погрешности полученных термодинамических функций.

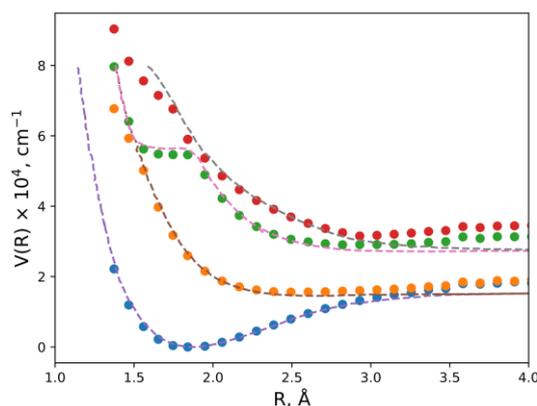


Рис. 1. Потенциальные кривые межатомного взаимодействия для триплетных состояний катиона нитрида аргона. Пунктирные линии – результаты работы [6], точки – результаты данной работы

Литература

1. Черноножкин С.М., Сапрыкин А.И. Применение лазерной абляции для анализа твердых образцов методом масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой // Масс-спектрометрия. 2012. Т. 9. С. 157.
2. Witte T.M., Houk R.S. Metal Argide (MAr^+) Ions Are Lost During Ion Extraction in Laser Ablation-Inductively Coupled Plasma-Mass Spectrometry // Spectrochim. Acta Part B. 2012. V. 69. P. 25.
3. Мальцев М.А., Осина Е.Л. Расчет термодинамических функций идеальных двухатомных газов // Вестник ОИВТ РАН. 2019. Т.2. с. 41.
4. Мальцев М.А., Осина Е.Л., Морозов И.В. Термодинамические свойства димеров аргона Ar_2^+ и Ar_2 // Теплофизика высоких температур. 2019. Т. 57 С. 42.
5. Мальцев М.А., Осина Е.Л., Морозов И.В. Термодинамические свойства ArN^+ и ArN // Теплофизика высоких температур. 2019. Т. 58. С. 367.
6. Brostrom L., Larsson M., Mannervik S., Sonnek D. The visible photoabsorption spectrum and potential curves of ArN^+ // The Journal of Chemical Physics. 1991. V. 94. P. 2734.

УДК 536.331

Лазерная рефлектометрия для повышения достоверности измерений истинной температуры полихроматическим пирометром

А.С. Булава^{1,2}, А.А. Васин², М.А. Шейндлин^{2,1}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Повышение точности и достоверности измерения истинной температуры является одним из ключевых вопросов в исследованиях сверхтугоплавких материалов с помощью лазерного нагрева. Особенности таких экспериментов – их плавление и интенсивное испарение, изменение оптических

свойств поверхности при взаимодействии с окружающей средой, невозможность создания модели абсолютно черного тела в образце – потребовало применение полихроматической (многоволновой) пирометрии. Метод определения истинной температуры и, соответственно, излучательной способности, подробно описан в [1, 2]. Для определения истинной температуры T и нормальной спектральной излучательной способности $\varepsilon(\lambda, T)$ применялся метод аппроксимации спектра теплового излучения образца функцией

$$E(\lambda, T) = \varepsilon(\lambda, T) \cdot P(\lambda, T),$$

где $P(\lambda, T) = \frac{C_1}{\lambda^5 \cdot (\exp(C_2 / \lambda \cdot T) - 1)} \cdot d\lambda$ – спектральная плотность энергии излучения абсолютно черного тела (функция Планка), $\varepsilon(\lambda) = a(T) + \lambda \cdot b(T)$ – линейная функция, характеризующая вид зависимости нормальной спектральной излучательной способности поверхности образца от длины волны.

Однако в ряде случаев обоснованность использования трехпараметрической подгонки (аппроксимации) для нахождения a , b и T нуждается в дополнительном обосновании, например в привлечении известных данных по излучательной способности или в проведении каких-либо дополнительных их измерений.

В настоящей работе предлагается дополнительно к измерениям с помощью спектропирометра измерять относительную направленную отражательную способность поверхности на двух «лазерных» длинах волн: 530 и 820 нм. При этом величина сигналов отражения определяется с помощью обработки спектров, зарегистрированных с помощью спектропирометра.

Для моделирования эксперимента с веществом с неизвестным характером поведения $\varepsilon(\lambda, T)$ были выполнены эксперименты по нагреву с помощью лазера мощностью 400 Вт, образца из вольфрама (вещества с хорошо определенной зависимостью $\varepsilon(\lambda, T)$) в среде аргона высокой чистоты. Соответствующая термограмма нагрева показана на рис. 1.

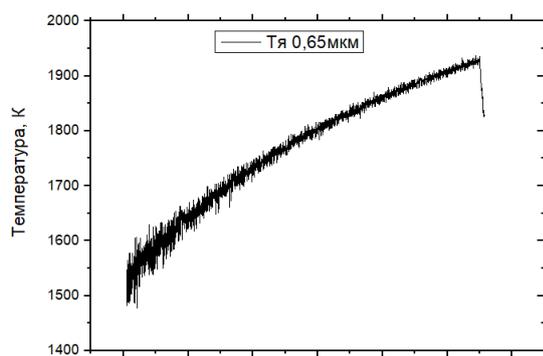


Рис. 2. Монохроматическая излучательная способность образца при различных температурах

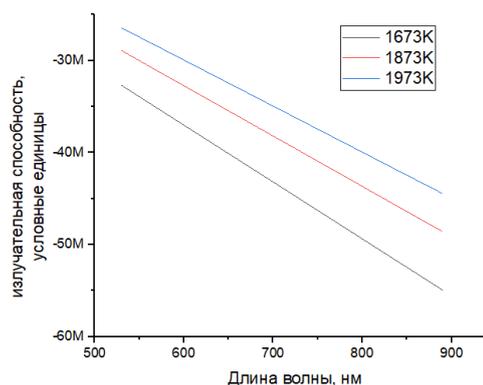


Рис. 1. Измеренная яркостная температура при нагреве образца

Были получены данные по излучательной способности вольфрама (рис. 2), хорошо совпадающие с имеющимися литературными данными. Сделан вывод о возможности применения указанного метода для определения истинной температуры в высокотемпературном теплофизическом эксперименте.

Литература

1. Bgasheva T, Falyakhov T, Petukhov S, Sheindlin M, Vasin A, Vervikishko P. Laser-pulse melting of calcium oxide and some peculiarities of its high-temperature behavior. J Am Ceram Soc. 2021;00:1–17.
2. Sheindlin M, Ronchi C, Heinz W. Recent advances in highspeed polychromatic pyrometry. In: Proceedings of 9th International Symposium on Temperature and Thermal Measurements in Science and Industry. Budapest: IMEKO; 2004.

УДК 530.145

Fractal states of the Schwinger model

E.V. Petrova^{1,2}, E.S. Tiunov^{1,2}, M.C. Banuls^{3,4}, A.K. Fedorov^{1,2}

¹ Russian Quantum Center, Skolkovo

² Moscow Institute of Physics and Technology

³ Max-Planck-Institut für Quantenoptik

⁴ Munich Center for Quantum Science and Technology (MCQST)

The Schwinger model describing quantum electrodynamics in 1+1 dimensions is a paramountly important test bench for studying lattice gauge theories, which are a fundamental concept in high energy physics. Although many properties and regimes of this model have been investigated during the last decades, the complexity of the lattice Schwinger model forces the develop advanced numerical approaches, such as tensor networks [1], and apply quantum simulation [2, 3], in its studies. Here we reveal a peculiar property of the Schwinger model associated with the fractal structure of its ground state Fig. 1. The self-similarity of the ground state allows using a recurrent procedure for finding the ground-state wave functions and predicting ground state energies. We provide the results of recurrent calculating ground-state wave functions using the analytical approach and automatized software package for image processing of fractals. Also, we demonstrate the results on ground state energies obtained with the recurrent procedure are close to those predicted by the state-of-the-art matrix product states approach up to 306 qubits. In addition, we show that the phase transition exhibiting in the Schwinger model can be characterized in terms of the change of the fractal structure of wave functions. Our findings pave the wave to understand the complexity of calculating many-body wave functions in terms of their fractal properties as well as to find new links between condensed matter and high-energy lattice models.

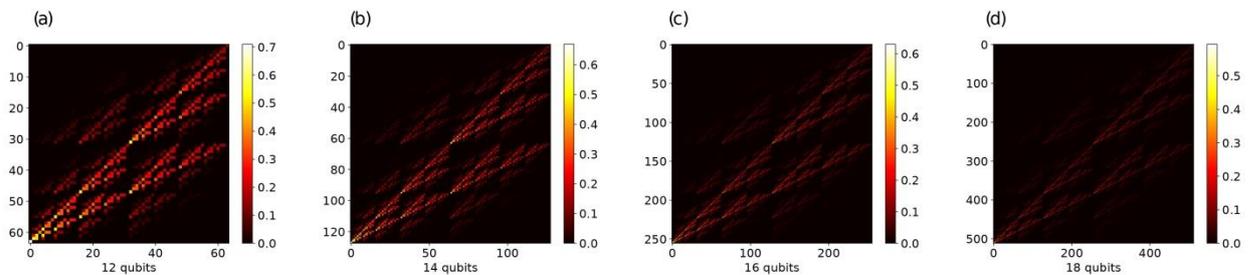


Fig. 1 Fractal structure of the GS wave functions of the model in the «qubism» representation [4] for $N = 12$, $N = 14$, $N = 16$, and $N = 18$ qubits. The qubism shows the main property: increasing the number of qubits reflects in an increase in the image resolution

This work is supported by the Russian Science Foundation Grant
N 20-42-05002 (studying the fractal approach for wave functions)
and the Russian Roadmap on Quantum Computing (calculating on ground-state energies).

Литература

1. *Bañuls M.C. et al.* The mass spectrum of the Schwinger model with matrix product states // Journal of High Energy Physics. 2013. T. 2013. № 11. C. 1-21.
2. *Kokail C. et al.* Self-verifying variational quantum simulation of lattice models // Nature. 2019. T. 569. № 7756. C. 355-360.
3. *Borzenkova O.V. et al.* Variational simulation of Schwinger's Hamiltonian with polarization qubits // Applied Physics Letters. 2021. T. 118. № 14. C. 144002.
4. *Rodriguez-Laguna J. et al.* Qubism: self-similar visualization of many-body wavefunctions // New Journal of Physics. 2012. T. 14. № 5. C. 053028.

Evolution of the optical qubit Wigner function under dissipation

N. Zunikov

Russian Quantum Center

The linear dissipation of an arbitrary single-mode optical system is considered in terms of Wigner function [1, 2]. An analytical expression is obtained for the Wigner function of this system after dissipation by direct calculation in the Heisenberg picture instead of calculating the time evolution of the density matrix in the thermal reservoir in the Schrodinger picture [3] or an approach using the characteristic function of the quadrature observable [4]:

$$W(q, p, \eta) = \frac{1}{\pi \hbar} \frac{1}{1-\eta} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy W(x, y) \exp \left\{ -\frac{(q - \sqrt{\eta} x)^2 + (p - \sqrt{\eta} y)^2}{1-\eta} \right\},$$

where the parameter η is the energetic transmittance of the channel describing the losses.

The density matrix of mixed-state qubit on basis vectors $|a\rangle$ and $|b\rangle$ can be written as:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} |a\rangle & |b\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1-a & \alpha \sqrt{a(1-a)} e^{i\varphi} \\ \alpha \sqrt{a(1-a)} e^{-i\varphi} & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |a\rangle \\ |b\rangle \end{pmatrix},$$

where the parameter a reflects the weight of $|a\rangle$ and $|b\rangle$ part in the qubit, the larger a the greater the proportion of the state $|b\rangle$. The parameter α shows the purity, $\alpha = 1$ relate to the pure state, $\alpha = 0$ indicates the maximally mixed state in terms of purity. The parameter φ is the phase difference between the basis states.

The linear dissipation of an optical mixed-state qubit on the following basis vectors is considered: (A) $|0\rangle$ and $|1\rangle$, (B) $|1\rangle$ and $|2\rangle$, (C) $|0\rangle$ and $|n\rangle$. The Wigner functions of these states after dissipation are obtained.

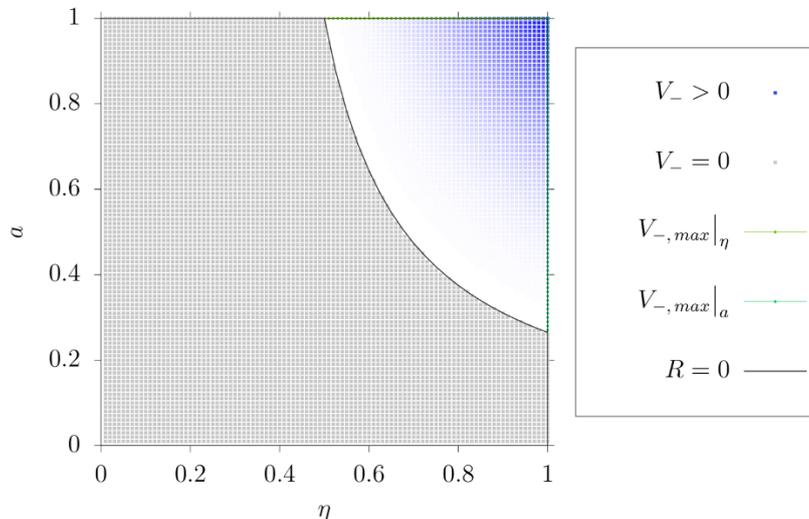


Fig. 1. The negativity of the Wigner function in the qubit of case (A) as a function of the parameters a and η for $\alpha = 0.8$. The color of the dots represents the negative volume of the Wigner function: blue corresponds to a high negative volume, white indicates a low one, gray refers to exactly zero negative volume. The green (cyan) line and dots shows the maximum negative volume at a specific η (a). The black line is an analytically defined bound of the existing negativity of the Wigner function

The evolution of nonclassicality of these states during linear dissipation is analytically and numerically investigated; the volume of the negative part of the Wigner function is chosen as a criterion of nonclassicality. Example for (A) case is demonstrated at Fig. 1.

Literature

1. Cahill K.E., Glauber R.J. Density operators and quasiprobability distributions // Phys. ReV. V. 177. 1969. P. 1882.
2. Schleich W.P. Quantum Optics in Phase Space // Wiley-VCH, Berlin, 2001.
3. Scully M.O., Zubairy M.S. Quantum Optics // Cambridge University Press, 1997. P. 248-256.

UDC 535.5

Polarization control protocol for QKD fiber systems

I.S. Gerasin^{1,2}, E.E. Mekhtiev^{1,2}, A.V. Duplinsky^{1,2}

¹QRate

²Moscow Institute of Physics and Technology

The fiber Quantum Key Distribution (QKD) systems can be implemented on the existing telecom infrastructure which is commonly deployed worldwide. However, a single-mode optical fiber does not maintain the polarization of the incident light due to the birefringence nature of the fiber. Thus, for polarization encoding QKD protocols the efficient polarization control system is required to provide a high secret key rate.

Such polarization control protocols require some source for feedback signal to compensate for the disturbances occurring in the Quantum Channel (QC). Usually, additional equipment [1], auxiliary pulses [2], or part of the final secret key [3] is used to calculate the feedback signal. Compared to the previous approaches we propose to use decoy-states statistics to calculate the feedback signal and compensate polarization drift in real-time. When polarization drift is too large, we stop key generation and switch to auxiliary pulses. The proposed protocol allows to do not affect key generation rate when decoy statistics is used, and rapidly deal with sudden polarization disturbance in QC via switching to auxiliary pulses.

Previously we investigate the different Gradient-descent-like algorithms to drive Electronic Polarization Controller (EPC), the device which is usually used to compensate for the polarization drift at the receiver side. The two algorithms demonstrate good stability in the minimum, however, the first one has the high convergence speed in the price of additional measurements far from the optimum, the second one does additional steps near the optimum in the price of slower convergence. So, for the state with auxiliary pulses, we utilize the first algorithm to provide fast recovery of minimal Quantum Bit Error Rate (QBER) and the second algorithm in order to preserve low mean QBER during key generation procedure.

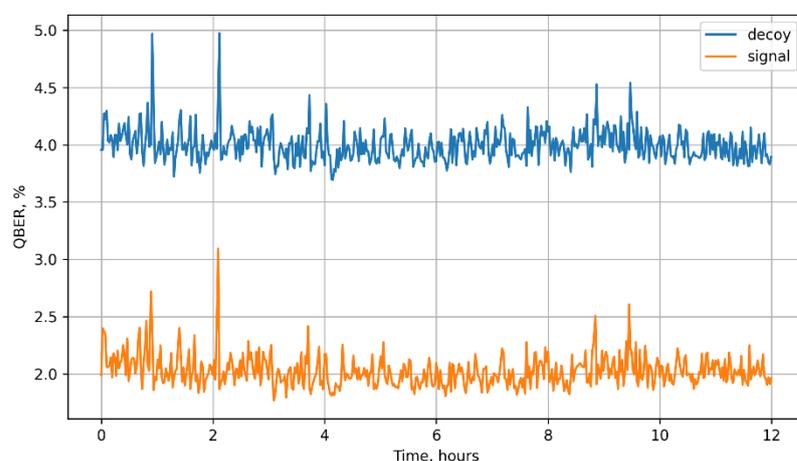


Fig. 1 QBER as a function of time

Polarization control protocol was implemented in QRate commercial fiber QKD system [4] and tested during 12 hours of continuous operation. Figure 1 shows the signal and decoy QBER for each post-processing block as a function of time. The peaks near 1, 2, and 9 hours correspond to switching to auxiliary pulses when QBER drifts rapidly. The average signal QBER is equal to 2.03% with a standard deviation of 0.14%.

This work was supported by The Russian Science Foundation (Grant N 17-71-20146)

References

1. *Xavier G.B., de Faria G.V., Tao G.P., von der Weid J.P.* Full polarization control for fiber optical quantum communication systems using polarization encoding // *Opt. Express* 16, 1867–1873 (2008).

2. *Chan J. et al.* Active polarization stabilization in optical fibers suitable for quantum key distribution // Opt. Express 15, 17928–17936 (2007).
3. *Ding Y.-Y, et al.* Polarization-basis tracking scheme for quantum key distribution using revealed sifted key bits // Opt. Letters 42, 1023–1026 (2017).
4. *Duplinskiy, A., Ustimchik, V., Kanapin, A., Kurochkin, V., & Kurochkin, Y.* Low loss QKD optical scheme for fast polarization encoding // Opt. Express 25, 28886–28897 (2017).

УДК 530.145

Treating the non-local correlations in the 2D Hubbard lattice in the vicinity of the atomic limit

Ya.S. Lyakhova^{1,2}, A.N. Rubtsov¹

¹Russian Quantum Center

²National Research Nuclear University MEPhI

Quantum information storing and processing techniques have a wide variety of physical realizations, from ultracold atoms in optical lattices [1] to topological materials [2]. Their accurate description represents a challenging problem not least because of collective fluctuating modes they can possess. Most of the known theoretical approaches are based on the mean field theory, and treat correlations perturbatively. It leads to significant inaccuracies when it comes to a strong correlation regime. The situation especially worsens in the vicinity of the atomic limit, which is important for the theoretical description, for example, of the mentioned atoms in optical lattices with their charge and spin correlations. In this work we suggest using the Fluctuating local field (FLF) approach to address this problem. Based on an exact transformation of the partition function, it allows treating the leading fluctuating modes regardless of their range.

We consider the 2D Hubbard system in the weak external magnetic field as a benchmark:

$$S = S_{at} - h\hat{s} + Hop, \quad (1)$$

$$Hop = t \sum_J \int_0^\beta \left\{ c_{J+x}^*(\tau) c_J(\tau) + c_{J+y}^*(\tau) c_J(\tau) + h.c. \right\} d\tau. \quad (2)$$

Let us assume that the system is half-filled, in which case it is known to tend to the antiferromagnetic ordering. FLF approach lies in the introduction of an artificial fluctuating field v coupled to the spin channel [3] as follows:

$$Z = A \iint \exp \left(-S_{at}(h) - \frac{\beta N}{2\lambda} \left(v - h - \frac{\lambda \hat{s}}{\beta N} \right)^2 - Hop \right) D[c^*, c] d^3 v, \quad (3)$$

where A is the normalizing constant, and λ will be defined later. Such a transformation introduces an additional instability channel, namely the long-range spin-spin interaction, which tends to set the ferromagnetic order, in contrast with the antiferromagnetic tendency of the kinetic term. Perturbative description of these two terms can be conducted using the thermodynamic perturbation theory [4]

$$F(h) \approx F^0(h) + \beta^{-1} \langle \Omega \rangle_0 - \frac{1}{2\beta} \left\langle \left(\Omega - \langle \Omega \rangle_0 \right)^2 \right\rangle_0, \quad (4)$$

where Ω is the perturbation w.r.t. the isolated atom with local density-density interaction, and $\langle \cdot \rangle_0$ means taking the average over the atomic ensemble, which can be solved exactly analytically.

The freedom of choosing the parameter λ allows tuning it to cancel FM-AFM corrections to the Landau free energy, which gives

$$F_{FLF} \approx F_0 + \frac{N}{2\lambda} (v - h)^2. \quad (5)$$

In this work we use the developed procedure to compute the Curie constant of the system

$$C(\beta) = \frac{\chi}{\beta}, \quad (6)$$

where χ is the magnetic susceptibility. The results of the computation for the Hubbard lattices of the sizes 2×2 and 4×2 are presented on the fig. 1 and fig. 2. The reference data were obtained via the exact diagonalization. We additionally supply the figures with the results obtained with the mean field theory for comparison. One can see that the FLF method yields qualitatively correct results for the system under consideration. It significantly surpasses the mean field approximation, showing an unphysical Néel transition. One can note that the closer the system is to the atomic limit, the better is the agreement between the exact and FLF results.

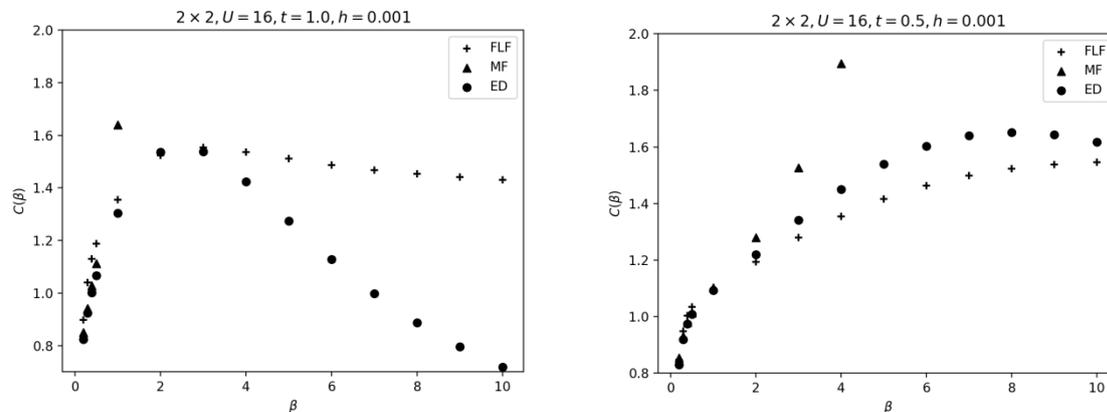


Fig. 1: Inverse temperature dependence of the Curie constant for 2×2 Hubbard system with $U/t = 16$ and $U/t = 32$, computed with the FLF approach (red points) and by the exact diagonalization (black points)

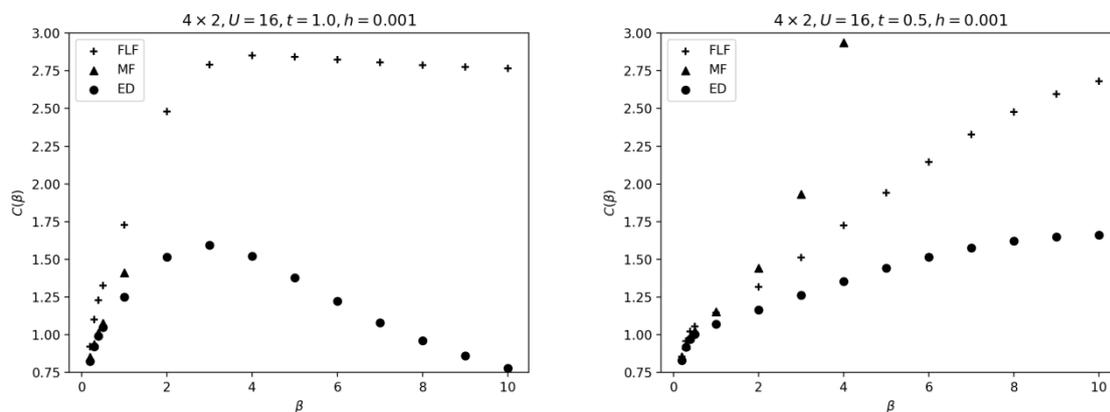


Fig. 2: Inverse temperature dependence of the Curie constant for 2×2 Hubbard system with $U/t = 16$ and $U/t = 32$, computed with the FLF approach (red points) and by the exact diagonalization (black points)

Bibliography

1. Hart R.A. et al. Observation of antiferromagnetic correlations in the Hubbard model with ultracold atoms // Nature. 2015. V. 519. P. 211.
2. O'Brien T.E., Rožek P., Akhmerov A.R., Majorana-based fermionic quantum computation // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 120. P. 220504.
3. Rubtsov A.N., Fluctuating local field method probed for a description of small classical correlated lattices // Phys. Rev. E. 2018. V. 97. P. 052120.
4. Landau L.D., Lifshitz E.M., Statistical Physics. P. 1. - Amsterdam: Elsevier, 2011.

New scheme of absolute standardless quantum photometry

*S. Y. Tsovianov^{1,2}, V. V. Zemlyanov^{1,2}, M. V. Lebedev^{1,2,3}, O.V. Misochko^{1,2,3}, A.V. Solovyov^{1,2},
G.B Lesovik^{1,2}*

¹Moscow Institute of Physics and Technology

²Terra Quantum AG

³Institute of Solid-State Physics, Russian Academy of Sciences

The paper presents a new scheme for calibrating single-photon detectors without using a standard. The absolute calibration method is based on the effect of spontaneous parametric down-conversion, when a pump photon decays into two photons - signal and idler. In the scattering process, the laws of conservation of energy and momentum are satisfied, leading to the necessary fulfillment of the conditions for frequency and spatial synchronism:

$$\omega_p = \omega_s + \omega_i \quad (1)$$

$$\mathbf{k}_p = \mathbf{k}_s + \mathbf{k}_i \quad (2)$$

here \mathbf{k} is the wave vector, and ω is the wave frequency. The subscript 'p' refers to the pump mode, while the subscripts 's' and 'i' refer to the signal and idle modes, respectively. Older designs involved the non-collinear case, but the new method uses the type I collinear synchronism, when $\omega_i = \omega_s$

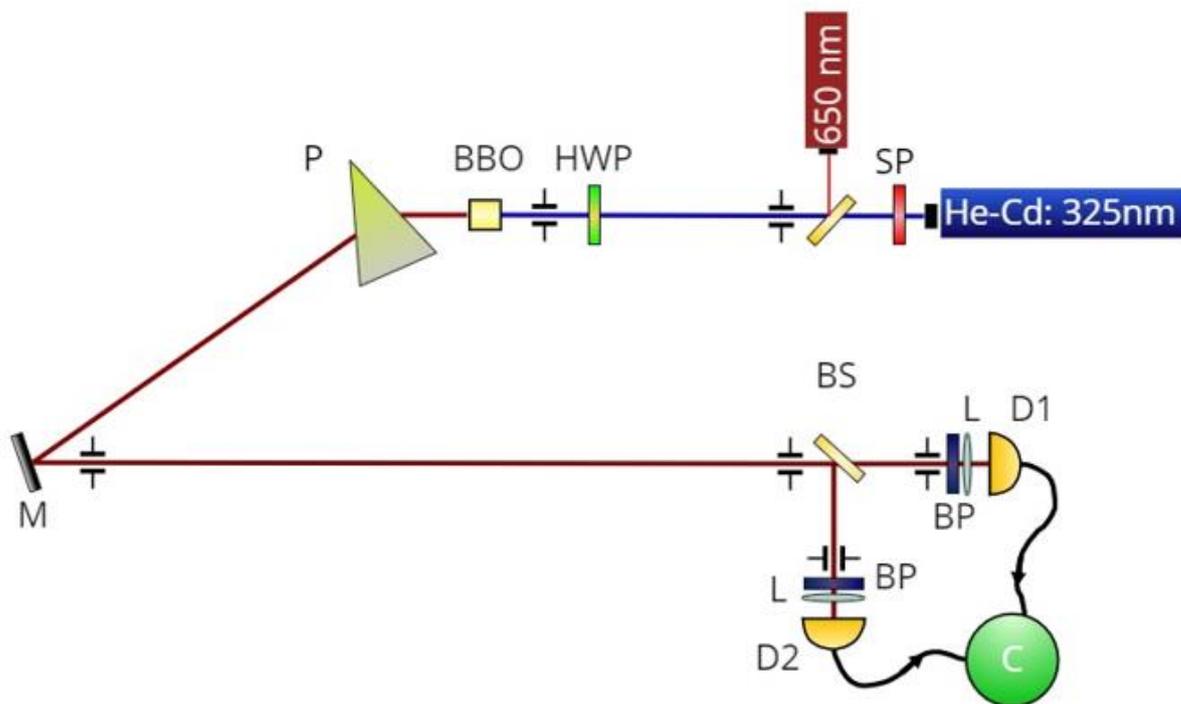


Fig. 1 Experimental setup. BBO - nonlinear crystal 5x5x5 mm, SP - Shortpass filter, BP - Bandpass filter, HWP - Half-wave plate, D1, D2 - single photon detectors, C - Coincidence circuit, BS - Beam splitter, M - Mirror, P - quartz prism, L - Lens

After passing through the crystal, the pump photons are deflected by a prism, and the beam of biphotons is directed to the beam splitter by a mirror. When passing through the beam splitter, photons from a pair can pass the beam splitter in one direction or pass in different directions. The number of counts N_1 and N_2 at each detector, as well as the number of coincidences N_c are determined by the following formulas:

$$\begin{aligned}
N_1 &= \alpha_1 \eta_1 T (2 - \alpha_1 \eta_1 T) M \\
N_2 &= \alpha_2 \eta_2 R (2 - \alpha_2 \eta_2 R) M \\
N_c &= 2(\alpha_1 \eta_1 T \alpha_2 \eta_2 R) M
\end{aligned}
\tag{3}$$

here α_1, α_2 are the losses in the lenses of the corresponding detectors, η_1, η_2 are the quantum efficiency, T and R are the transmission and reflection coefficients of the beam splitter, M is the total number of biphotons. From this system, one can obtain expressions for the quantum efficiency of the detectors:

$$\begin{aligned}
\eta_1 &= \frac{2(2n_1 - 1)}{\alpha_1 T (4n_1 n_2 - 1)} \\
\eta_2 &= \frac{2(2n_2 - 1)}{\alpha_2 R (4n_1 n_2 - 1)} \\
n_i &= \frac{N_i}{N_c}, i = 1, 2
\end{aligned}
\tag{4}$$

According to the results of the experiment, the calculated values of the quantum efficiency for each detector are 35%. These values differ from the passport values 70% by 2 times. A similar discrepancy was observed earlier in other methods of absolute standardless quantum photometry [1, 2]. The difference between passport values and experimental result in this work can be attributed to unaccounted losses in the optical channel. This method can potentially be used for calibrating single-photon detectors without the need of using a calibration standard.

References

1. *Klyshko D.N., Penin A.N.* The prospects of quantum photometry. *SoV. Phys. UsP.* 30 716–723 (1987)
2. *Penin A.N., Sergienko A.V.* Absolute standardless calibration of photodetectors based on quantum two-photon fields // *Applied Optics.* 1991. 30(25).

UDC 53.03

Trace decoherence measure as a way of errors estimation in quantum computing

A.A. Kurkin¹, L.E. Fedichkin^{1,2}

¹Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia

²Valiev Institute of Physics and Technology of RAS, Moscow, Russia

Nowadays a great deal of attention is paid to quantum computing. For physically implementing a quantum computer, many different candidates are being pursued (distinguished by the physical system used to realize the qubits) [1]. The main obstacle to realizing a full-scale quantum computer is decoherence [2]. It is usually defined as a process whereby the physical system of interest interacts with environment and because of this interaction, changes its evolution. In quantum computing errors accumulate linearly with the number of qubits in the quantum register instead of classical case. That's why in order to create quantum computer with enough number of qubits and at the same time being able to solve practically useful problems, we should decrease error rate up to a certain threshold to be able to use quantum error correction algorithms. Thus, we need one parameter, which estimate error level. For description of some decoherence processes such approaches as relaxation time scales, quantum entropy or fidelity are not applicable [3]. We considered an alternative universal way of error description in quantum computing, namely, decoherence measure based on trace norm of deviation matrix and studied its properties.

The measure of decoherence based on the norm of deviation was defined [4] as the supremum of density matrix norm, taken over all initial states of a quantum computer:

$$D = \sup_{\rho(0)} (\| \sigma(t, \rho(0)) \|) \tag{1}$$

where $\sigma(t, \rho(0))$ is difference between current and ideal density matrixes at any moment of time. It is important to note here the need to take the supremum over all initial states. Since, according to this definition, the measure

of decoherence characterizes how much the evolved density matrix differs from the ideal one in the worst case. Thus, the measure of decoherence is the upper bound of the error. As a norm in equation (1) we use trace norm.

We dwelt on processes of decoherence typical for qubits based on double semiconductor dots, namely relaxation and dephasing. Firstly, we started with numerical calculation decoherence measure behavior of 2-qubit system for mentioned nose types. We did it in the following way:

1. Generated a large number (about 100) of pseudo-random pure density matrices $\{\rho_j(0)\}$ of size 4×4 .
2. Calculated their evolution and found deviation matrixes.
3. Considered that set $\{\rho_j(0)\}$ represents all possible initial states, so we found supremum among them.

It was considered such combinations of noise: dephasing + dephasing, relaxation + relaxation, dephasing + relaxation. The results you can see on the Fig.1. We are convinced that the trace measure of decoherence increases monotonically, reaching the maximum, as the error should behave. We see that the sum of the decoherence measures of the subsystems is the upper bound for the decoherence measure of the complete system:

$$D_{system} \leq D_1 + D_2$$

Moreover, the additivity property is satisfied at sufficiently short times:

$$D_{system} \approx D_1 + D_2$$

We generalized observed short time additivity property for multiqubit systems for dephasing and relaxation cases:

$$D^{Tr}(t) = \sum_j D_j^{Tr}(t) + o\left(\sum_j D_j^{Tr}(t)\right) \quad (2)$$

Thus, we can calculate the measure of decoherence of our quantum system of interest as a sum of decoherence measures of each single qubit. This property extremely simplifies estimation of error level in large quantum registers. Received results can be applied to analyze the decoherence of various quantum systems.

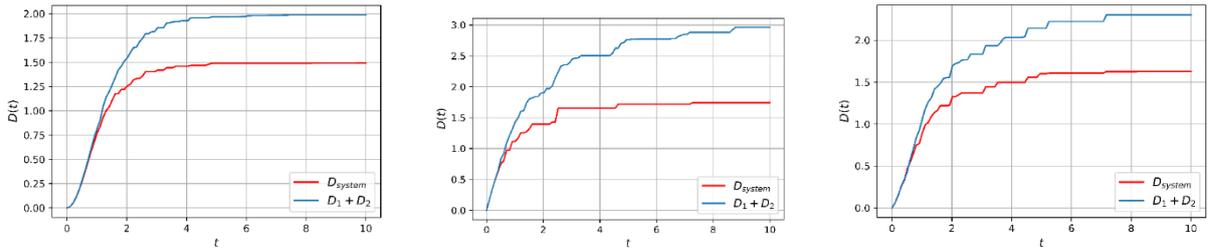


Fig. 1. Decoherence measure based on trace norm for dephasing + dephasing, relaxation + relaxation and dephasing + relaxation processes

References

1. Nielsen, M. A. and Chuang, I. L., [Quantum Computation and Quantum Information], Cambridge University Press (2000).
2. DiVincenzo, D. P., «The physical implementation of quantum computation,» Fortschr. Phys. 48, 771(2000).
3. Fedichkin, L. and Privman, V., «Quantitative Treatment of Decoherence,» arXiv:cond-mat/0610756(2006).
4. Arkady Fedorov, Leonid Fedichkin, and Vladimir Privman, «Evaluation of Decoherence for Quantum Control and Computing,» arXiv:cond-mat/0401248v2(2004).

Quantum tomography of states containing large photon numbers

E.A. Fedotova^{1,2}, E.S. Tiunov^{1,2}, N.S. Kuznetsov^{1,2}, A.I. Lvovsky^{1,3}

¹Russian Quantum Center

²Moscow Institute of Physics and Technology

³Department of Physics, University of Oxford

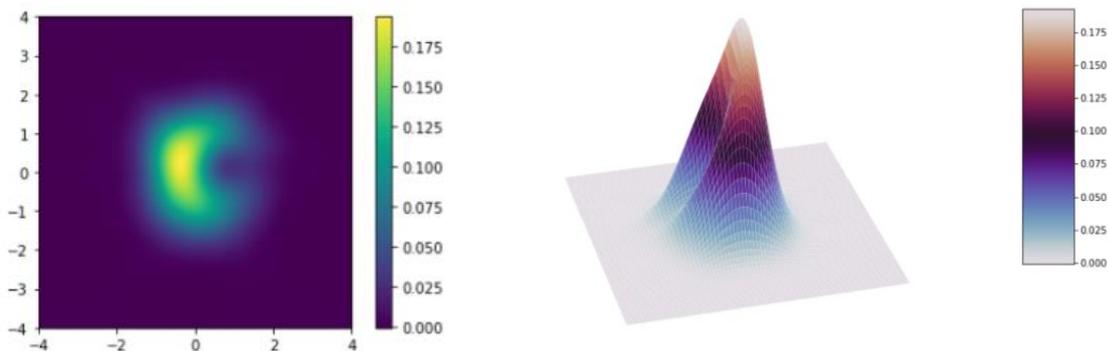
Nowadays, homodyne detection is widely used for measuring continuous amplitudes of light [1]. In quantum mechanics, the mode of an electromagnetic field is equivalent to a harmonic oscillator. Homodyne detector measures quadratures which are eigenvalues of the position operator in the rotated frame $X_\theta = X\cos\theta + P\sin\theta$, where the θ sets the frame of reference. In the experiment, $\{\theta_i\}$ is the phase of the local oscillator, and $\{X_{\theta_i}\}$ is measured by a homodyne detector. In this work, our goal is to reconstruct a density matrix or a wave function based on the measured quadratures.

Now, typical tomography protocol reconstructs a state in the Fock basis. However, such methods are unable to make a tomography of states containing large number of photons. To tackle this problem, we propose to reconstruct a continuous wavefunction in the position basis [2]. The heart of our algorithm is a feedforward neural network. Neural networks are universal approximators. Hence, it's convenient to utilize them for finding wave functions with arbitrary complexity. Such Ansatz provides a mapping between position and corresponding value of the wavefunction [3]. To optimize the parameters of a neural network, the likelihood optimization method is used.

The described method has been tested on theoretically generated data and experimental ones. We reconstructed wave functions of pure states, such as one photon, 4 photons, superposition of one and two photons, Schrödinger's cat with amplitude 10. Comparison with theory gives the fidelity more than 99.8%.

Our algorithm also allows to reconstruct states of open quantum systems, i. e. density matrices. To assess the quality of the algorithm, a comparison is made with the theory and with the result of the well-known tomography algorithm – MaxLik [4]. The method of correction for losses is also applied. Reconstructed density matrices of the one photon, the displaced photon, the superposition of zero, one and two photons, the Schrödinger's cat with the amplitude 2 give fidelity with MaxLik algorithm in the range of 97-99%. These reconstructions are based on the experimental data.

The primary goal of our method is to reconstruct wavefunctions which are limited by several hundreds of photons. We numerically generate quadratures of the cat state with amplitude 10. For now, fidelity between reconstructed wavefunction and ideal state is 91%. We are currently trying to improve this result.



Fig(1). Reconstructed density matrix from the experimental data: on the left is the real part, on the right - Wigner function based on this matrix. Comparison with the MaxLik method gives 99.5% overlap

Literature

1. *Tiunov E.S., Tiunova (Vyborova) V. V., Ulanov A.E., Lvovsky A.I., and Fedorov A.K.* Experimental quantum homodyne tomography via machine learning // *Optica* V. 7, Issue 5, P. 448-454 (2020)
2. *Lvovsky A.I. and Raymer M.G.* Continuous-variable optical quantum-state tomography // *Rev. Mod. Phys.* 81, 299
3. *Man'ko V. I., Moshinsky M. and Sharma A.* Diffraction in time in terms of Wigner distributions and tomographic probabilities // *Phys. Rev. A* 59, 1809
4. *Lvovsky A.I.* Iterative maximum-likelihood reconstruction in quantum homodyne tomography // *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, V. 6, Number 6

Parametric Two-qubit Gate for Fluxonium Circuits

Ilya N. Moskalenko^{1,2}, Ilya S. Besedin^{1,2}, Ilya A. Simakov^{1,2,3}, and Alexey V. Ustinov^{1,2,4}

¹Russian Quantum Center

²National University of Science and Technology «MISIS»

³Moscow Institute of Physics and Technology

⁴Physikalisches Institut, Karlsruhe Institute of Technology

We propose a tunable coupling scheme for implementing parametric two-qubit gates on fixed-frequency fluxonium qubits, biased at a half flux quantum. The principal scheme and electric circuit of the system are shown in Figure 1. The effective Hamiltonian for the circuit can be written as:

$$\widehat{H}_{\text{full}} = \widehat{H}_{f_1} + \widehat{H}_{h_c} + \widehat{H}_{f_c} + \widehat{H}_{f_2} + \widehat{H}_{\text{int}},$$

where first four terms describe the independent Hamiltonian for qubit and coupler modes and \widehat{H}_{int} is responsible for the effective qubit-qubit interaction.

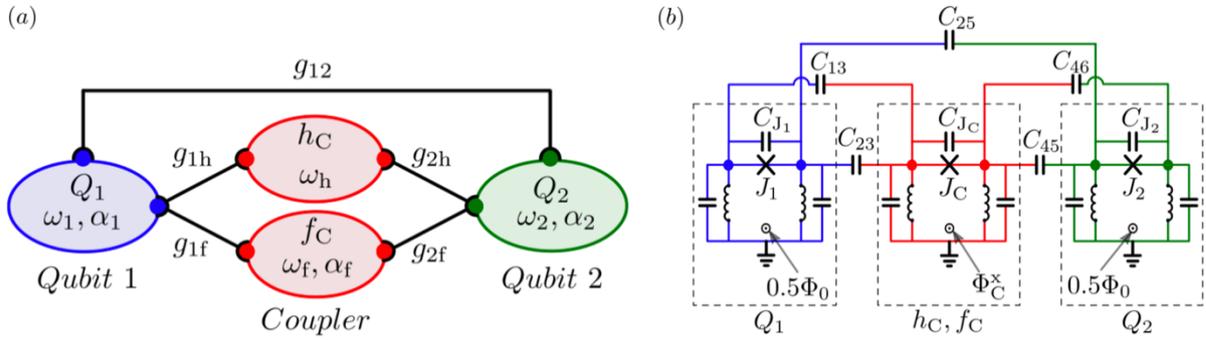


Figure 4. Simplified system schematic. Two fluxonium qubits (f_1 , f_2) are capacitively coupled via a coupler with harmonic (h_c) and tunable fluxonium (f_c) modes. (b) Electric circuit schematic. Each mode is highlighted in different colours (qubit mode 1 (blue), qubit mode 2 (green), and coupler mode c (red)). The computational qubits are biased at the flux degeneracy point

To analyze the performance of the setup we numerically simulate a universal fSim gate with the swap angle $\theta = -\pi/4$ and arbitrary conditional phase φ . Its matrix representation is given by:

$$\text{fSim}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta) & -i\sin(\theta) & 0 \\ 0 & -i\sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix}.$$

The choice of angles is due to the fact that maximally entangling CPHASE gate can be constructed with two fSim($-\pi/4, \varphi$) and single-qubit gates.

To implement the parametric gate we tune the coupling qubit to the point $\Phi_c^x = 0.5\Phi_0$ and induce the xx interaction between $|10\rangle$ and $|01\rangle$ computational states as it is shown in Figure 2a. The swap angle is controlled by the gate duration and smoothing out the edges of the signal we can get rid of the unwanted leakage from $|11\rangle$ state.

The optimized drive is provided in Figure 2b and the time evolution of the computational states during the gate are presented in Figure 3. The duration of the calculated gate is 35 ns, $\varphi = -0.07\pi$ and the obtained fidelity is above 0.9999.

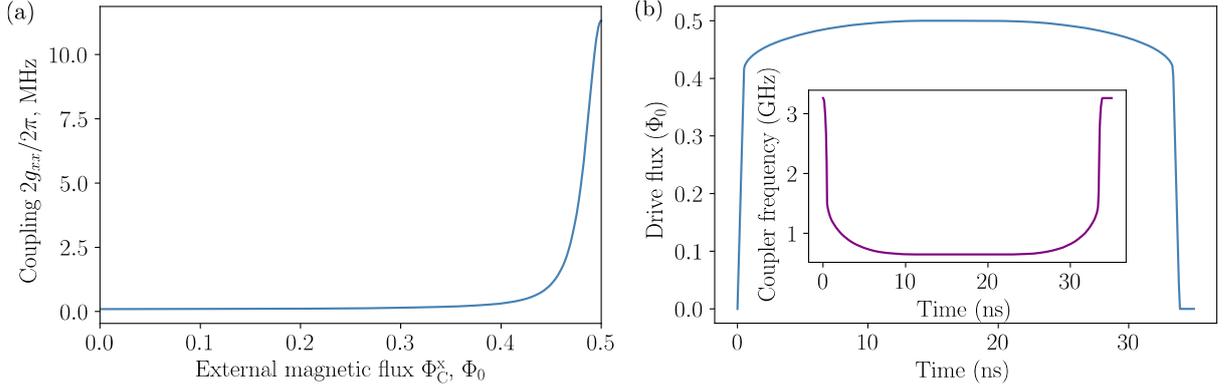


Figure 2. (a) Effective transverse coupling strength as a function of the magnetic flux threading the coupler loopP. (b) Shape of drive flux signal and corresponding frequency of the coupler fluxonium mode (inserted plots)

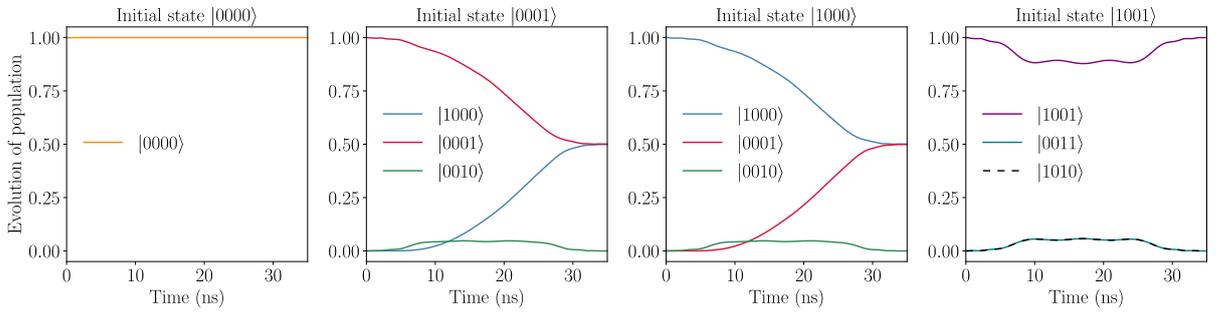


Figure 3. Time evolution of populations for four initial computational states during the gate. The state notation corresponds to the mode occupations of the Hamiltonian of the circuit as follows: from $|f_1 f_c f_2\rangle$, where f_1, f_2 relate to computational qubits, f_c and f_c are harmonic and fluxonium modes of the tunable coupler

References

1. Fei Yan, Youngkyu Sung, Philip Krantz, Archana Kamal, David K. Kim, Jonilyn L. Yoder, Terry P. Orlando, Simon Gustavsson, and William D. Oliver. Engineering Framework for Optimizing Superconducting Qubit Designs. arXiv:2006.04130v1 (2020)
2. Vladimir E. Manucharyan, Jens Koch, Leonid I. Glazman, Michel H. Devoret Fluxonium. Single Cooper-Pair Circuit Free of Charge Offsets Science, V. 326, P. 113-116, (2009)
3. Quentin Ficheux, Long B. Nguyen, Aaron Somoroff, Haonan Xiong, Konstantin N. Nesterov, Maxim G. Vavilov, and Vladimir E. Manucharyan. Fast logic with slow qubits: microwave-activated controlled-Z gate on low-frequency fluxoniums. Phys. Rev. X 11, 021026,3 (2021)

UDC 538.941

Strongly interacting two-dimensional dipolar Fermi gases

V.Y. Pinchenkova^{1,2}, G.V. Shlyapnikov^{2,3,4}, S.I. Matveenko^{2,5}

¹Moscow Institute of Physics and Technology

²Russian Quantum Center

³Université Paris-Saclay, CNRS, LPTMS

⁴Van der Waals–Zeeman Institute, Institute of Physics, University of Amsterdam

⁵L. D. Landau Institute for Theoretical Physics

We consider a two-component ultracold Fermi gas with a long-range dipole-dipole interaction and a short-range contact interaction in the two-dimensional geometry. Apart from fundamental interest, this research has practical applications. With the help of ultracold quantum gases one can build quantum simulators. They predict the evolution of interacting many-body systems.

We will use the model of Leggett [1]. In this model one can use Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) theory to qualitatively recover the physics throughout the BCS-BEC crossover. The first equation in our theory

is a gap equation in a weak disorder ($\tau E_F \gg 1$, where τ is the inverse disorder-induced scattering rate, and E_F the Fermi energy):

$$\Delta_k = -\int f(k', k) \Delta_{k'} \left[K(k') - \frac{1}{2(E_{k'} - E_k)} \right] \frac{d^2 k'}{(2\pi\hbar)^2}, \quad (1)$$

where

$$K(k) = \frac{i}{2\pi} \frac{\Psi\left(\frac{1}{2} - \frac{iz_k}{2\pi T}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2}\right)}{z_k} + c.c., \quad (2)$$

$\Psi(x)$ - the digamma function, $z_k = \varepsilon_k + i/2\tau$, $\varepsilon_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}$, $\xi_k = E_k - \mu$, $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, μ - the chemical potential, m - the particle mass, \hbar - the reduced Planck constant, Δ_k - the gap, T - temperature in units of an energy, the Boltzmann constant $k_B = 1$. The interaction potential is characterized by the scattering amplitude $f(k', k)$:

$$f(k', k) = F_0 - 8d^2 \max(k', k), \quad (3)$$

where F_0 - the local part of the scattering amplitude, d - the particle dipole moment. We considered a dilute limit. It means that $k_F r_* = 1$, where $r_* = md^2$ - the dipole-dipole distance, k_F - the Fermi momentum. The second equation in the theory of Leggett is the normalization condition:

$$n = \int \left[1 - \frac{\xi_k}{\varepsilon_k} \tanh\left(\frac{\varepsilon_k}{2T}\right) \right] \frac{d^2 k}{(2\pi\hbar)^2}, \quad (4)$$

where n - the fermion density. Using eq. (1) and (4) one can find BCS superfluid transition (critical) temperature.

Strictly speaking, in two dimensions we have the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) superfluid phase transition with temperature T_{BKT} . At this temperature the superfluid density n_s undergoes a jump, and just below T_{BKT} the superfluid density satisfies the Nelson-Kosterlitz relation [2]:

$$n_s(T_{BKT}) = \frac{8mT_{BKT}}{\pi\hbar^2}. \quad (5)$$

From [3] we have an expression for n_s in the presence of a short-range disorder potential:

$$\frac{n_s(T)}{n} = \pi T \sum_{\omega_N} \frac{\Delta^2}{(\sqrt{\Delta^2 + \omega_N^2} + 1/2\tau)(\Delta^2 + \omega_N^2)}, \quad (6)$$

with $\omega_N = \pi T(2N + 1)$, N - integer, Δ - a static, uniform gap. From eq. (5) and (6) one can find T_{BKT} .

In Fig. 1 we compare T_{BKT} with critical temperature T_c^0 in a clean case ($\tau \rightarrow \infty$). We see that in the weakly interacting regime ($\lambda = 1$, $\lambda = |f_0| m / 2\pi\hbar^2$, $f_0 = f(k_F, k_F)$) the BKT temperature is very close to that calculated in the BCS approach. However, with increasing λ the difference between T_{BKT} and BCS critical temperature becomes substantial.

Another interesting question is the interplay between interaction and disorder. From [4] we know that disorder can significantly change the critical BCS temperature. Using eq. (5), (6) one can estimate influence of disorder on T_{BKT} . We assume that disorder will change T_{BKT} too.

In conclusion, in this work we have calculated superfluid transition BCS temperature and the temperature of the BKT transition from weak to strong inter-particle interaction. In addition, we have discussed the interplay between interaction and disorder.

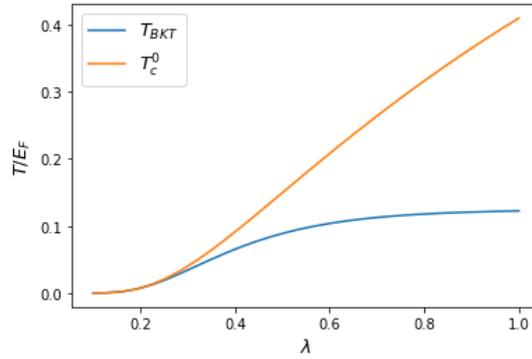


Figure 1. BCS temperature T_c^0 and BKT temperature T_{BKT} in units of E_F as a function of λ in the clean case

References

1. *Leggett A.J.* Diatomic molecules and Cooper pairs, in: A. Pekalski, R. Przystawa (Eds.), *Modern trends in the theory of condensed matter*, V. 115 of Lecture Notes in Physics // Springer-Verlag, Berlin, 1980, P. 13.
2. *Nelson D.R., Kosterlitz J.M.* Universal Jump in the Superfluid Density of Two-Dimensional Superfluids // *Phys. Rev. Lett.* 39, 1201, 1977.
3. *Coleman P.* *Introduction to Many Body Physics* // Cambridge: Cambridge University Press, 2011.
4. *Matveenko S.I., Yudson V. I., Altshuler B.L., Shlyapnikov G.V.* Superfluid transition in disordered dipolar Fermi gases // *Phys. Rev. A* 102, 053319, 2020.

УДК 53.05

Two-qubit CZ gate using two tunable inductively coupled fluxoniums

Grigoriy S. Mazhorin^{1,2,3}, Ilya N. Moskalenko^{1,3}, Ilya S. Besedin^{1,3}, Alexey V. Ustinov^{1,2,4}

¹Russian Quantum Center

²Moscow Institute of Physics and Technology

³National University of Science and Technology «MISIS»

⁴Physikalisches Institut, Karlsruhe Institute of Technology

Fluxonium is one of the most promising qubits due to high coherence times (~ 1 ms) and high anharmonicity (~ 1 GHz) [1]. The fluxonium-qubit contains a phase slip Josephson junction, a shunt capacitance and a Josephson junction array acting as a superinductance. We propose a tunable scheme for implementing two-qubit gates on inductively coupled fluxoniums. The electrical scheme and energy parameters are shown in figure 1. A scheme with capacitive coupling was discussed in [2, 3]. This approach faces difficulties with high qubits anharmonicity and substantial coupling. The proposed scheme is free of this problem. We simulate the system dynamics during the flux pulses and determine optimal pulse shape parameters for performing high fidelity CZ gate. The results of the simulation are presented in figure 2. The fidelity of this gate is equal to 0.9999.

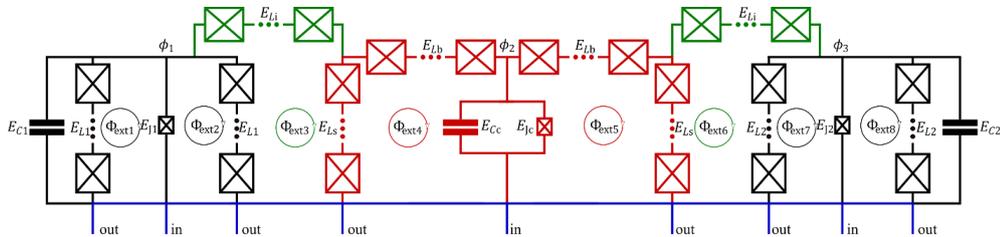


Fig. 1. The equivalent electrical circuit. Each element is highlighted in different colors (qubits (black), coupler (red), coupling inductance (green), ground (blue)). The energy parameters of circuit elements are given below $E_L = 0.3$ GHz, $E_{Lb} = 0.15$ GHz, $E_{Ls} = 1.35$ GHz, $E_{C1} = 20$ GHz, $E_{C2} = 21$ GHz, $E_{Cc} = 30$ GHz, $E_{j1} = E_{j2} = E_{jc} = 7$ GHz, $E_{Li} = 0.5$ GHz

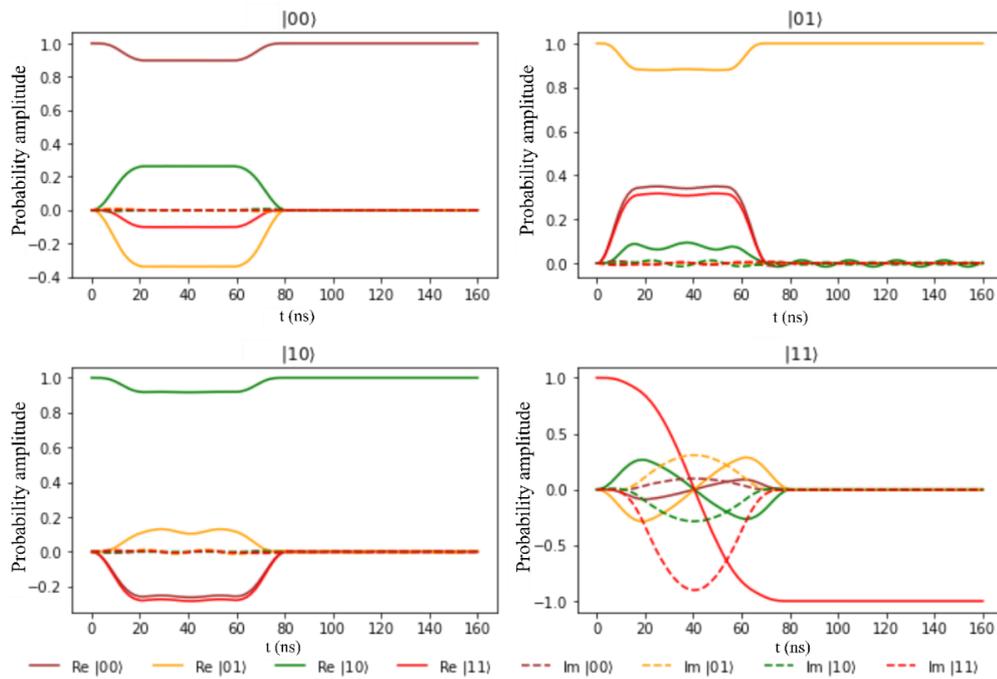


Fig. 2. Probability amplitudes of final states for different initial states (they are presented as titles of corresponding graphs). Different colors stand for different final states, solid lines show the real parts, dashed lines show the image parts

References

1. *Manucharyan V. E., Koch J., Glazman L.I., Devoret M.H.*, Fluxonium: Single Cooper-Pair Circuit Free of Charge Offsets Science, V. 326, P. 113-116, (2009).
2. *Moskalenko I.N., Besedin I.S., Simakov I.A., and Ustinov A.V.*, Tunable coupling scheme for implementing two-qubit gates on fluxonium qubits, arXiv:2107.11550 (2021).
3. *Ficheux Q., Nguyen L.B., Somoroff A., Xiong H., Nesterov K.N., Vavilov M.G., and Manucharyan V. E.*, Fast logic with slow qubits: microwave-activated controlled-Z gate on low-frequency fluxoniums, Phys. ReV. X V. 11, P. 021-026, (2021).

UDC 53.043

Simulation of Rabi oscillations with cross-damping in three-level Vee system

N.D. Korolev, L.A. Akopyan, A.N. Matveev, K.E. Lakhmanskiy

Russian Quantum Center

Quantum computations on atomic/ion system rely on the coherent interaction of a two-level quantum system with external resonant field. Atom field interaction is characterized by Rabi frequency which together with interaction time with the laser field determines quantum gates/operations. The fidelity characterizes the quality of such operations and can be affected by spontaneous decay and other decoherence processes. To investigate this effect, we perform QuTiP numerical simulations of master equation with the inclusion of multi-level decoherence processes.

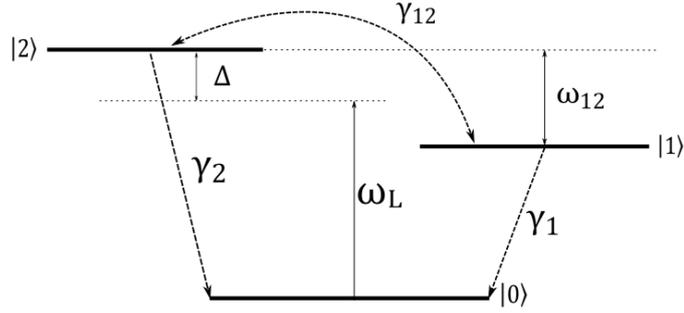


Fig. 1. Energy-level scheme of a three-level atom in the Vee configuration driven by a single laser field coupled to both atomic transitions

Figure 1 shows the level scheme of a three-level V-type system that interacts with the vacuum so that spontaneous decay may take place from the two excited levels to the ground state. The master equation of the system in the frame rotating with the laser frequency ω_L is shown below ($\hbar = 1$):

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] + \mathcal{L}\rho,$$

where

$$H = (\Delta - \omega_{12})A_{11} + \Delta A_{22} + [(\Omega_1 A_{10} + \Omega_2 A_{20}) + H.c.],$$

and $\mathcal{L}\rho$ is the damping term (Lindbladian):

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\rho = & \frac{1}{2}\gamma_1(2A_{01}\rho A_{10} - A_{11}\rho - \rho A_{11}) + \frac{1}{2}\gamma_2(2A_{02}\rho A_{20} - A_{22}\rho - \rho A_{22}) + \\ & + \frac{1}{2}\gamma_{12}(2A_{01}\rho A_{20} - A_{21}\rho - \rho A_{21}) + \frac{1}{2}\gamma_{12}(2A_{02}\rho A_{10} - A_{12}\rho - \rho A_{12}). \end{aligned}$$

In these equations, $A_{ij} \equiv |i\rangle\langle j|$ is the transition (jump) operator, $\Delta = \omega_2 - \omega_L$ is the detuning between the frequency ω_2 of the $|0\rangle \rightarrow |2\rangle$ transition and the driving laser frequency, Ω_k is the Rabi frequency of the k^{th} transition ($k = 1, 2$), and $\omega_{12} = \omega_2 - \omega_1$ is the level splitting between the excited sublevels. Here γ_i is the spontaneous decay constant of the excited sublevel $|i\rangle$ ($i = 1, 2$) to the ground level $|0\rangle$, while the cross-damping terms

$$\gamma_{ij} = \frac{4\pi\sqrt{\omega_i^3\omega_j^3}}{3hc^3} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j = \beta\sqrt{\gamma_i\gamma_j} \quad (i \neq j = 1, 2)$$

arise from the quantum interference between the transitions $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$ and $|2\rangle \rightarrow |0\rangle$.

Figure 2 represents the occupation probabilities of different states for a two-level system and a three-level system in the absence of quantum interference ($\beta = 0$).

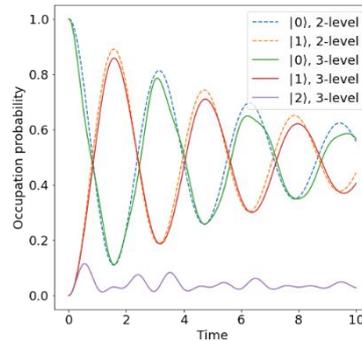


Fig. 2. Energy levels' occupation probability vs. time for a two-level system and a three-level system without cross-damping in external field for $\gamma_1 = 0.2, \gamma_2 = 0.3, \Delta = 5.0, \Omega_1 = \Omega_2 = 1, \omega_{12} = 5.005$

Figure 3 shows the occupation probabilities of different states for three-level systems without quantum interference and with full quantum interference ($\beta = 1$).

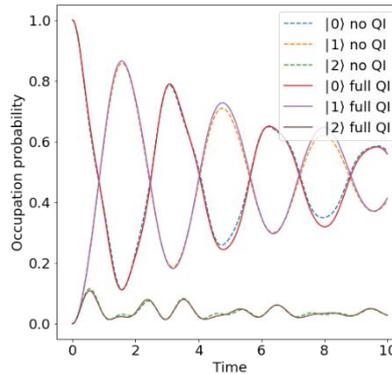


Fig. 3. Energy levels' occupation probability vs. time for a three-level system with full cross-damping included and a three-level system without cross-damping in external field for $\gamma_1 = 0.2$, $\gamma_2 = 0.3$, $\Delta = 5.0$, $\Omega_1 = \Omega_2 = 1$, $\omega_{12} = 5.005$

Our results demonstrate how the presence of the third energy level affects the Rabi oscillations between ground and excited states of a two-level system in near-resonant external fields and the fidelity of quantum operations.

Literature

1. Ficek Z., Swain S. Quantum interference and coherence: theory and experiments. - New York. Pub. Springer, 2005 436 P.
2. Ficek Z., Swain S. Simulating quantum interference in a three-level system with perpendicular transition dipole moments // Physical Review A 69, 023401 (2004)
3. Horbatsch M., Hessels E.A. Shifts from a distant neighboring resonance // Physical Review A 82, 052519 (2010)
4. Андрианов Е.С., Виноградов А.П., Пухов А.А. Лекции по квантовой оптике: учеб. пособие М.: МФТИ, 2018. 226 с.

UDC 539.1

Addressing to individual qubits while performing single-qubit operations with single rubidium atoms

I. I. Beterov², P. I. Betleni^{1,2}

¹Novosibirsk State University

²Rzhanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences

Neutral rubidium atoms ^{87}Rb are currently one of the possible physical realizations of qubits. To control such a qubits the atoms are cooled inside a magneto-optical trap to roughly 100 μK temperature. Then the atoms are captured into array of dipole traps. In our experiment, the array is formed by non-resonant ($\lambda \sim 850$ nm) laser beam focused after wavefront correction. In the case of rubidium atoms, hyperfine sublevels of the ground state $5s_{1/2}$ ($|5s_{1/2}, F = 2, m_F = 0\rangle$ and $|5s_{1/2}, F = 1, m_F = 0\rangle$) are used as logical zero and one. Transitions between the hyperfine ground state levels are induced by microwave radiation at a frequency of 6.8 GHz.

Quantum computations require performing single-qubit gates. However, it is impossible to focus microwave radiation to control an individual qubit, since the distance between the trapped atoms is much less than the microwave wavelength. Thus, there is the need for an additional addressing system for individual qubits.

In this work an individual addressing system was realized in a setup of two dipole traps using an additional laser beam detuned from a resonance at 50-100 GHz at a wavelength of 795 nm. An acousto-optic deflector was placed in the path of this beam, in which a sound wave at a frequency of 100.7 MHz and 99.7 MHz was created. Due to diffraction, the laser beam was deflected so that it was focused into one of the dipole traps located at a distance of 17 μm from each other. The frequency of the microwave resonance in the trap was shifted by 10-30 kHz because of the dynamic Stark effect. As a result, the population transfer in such an atom ceased to occur while interacting with microwave radiation.

Figure 1 shows the experimentally obtained Rabi oscillations of rubidium-87 atoms in the first (solid gray line) and second (dashed black line) traps. That is equivalent to implementation of the basic single-qubit operations such as the NOT gate and the Hadamard gate. Oscillations occur separately in each of the traps, in

the absence of oscillations in the adjacent traP. Thus, individual addressing was realized in a system of two qubits.

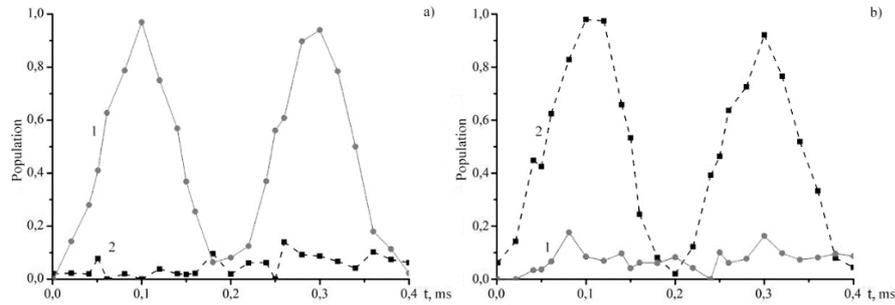


Fig. 1. The $|5s_{1/2}, F = 1, m_F = 0\rangle$ population in each of the two dipole traps as a function of the microwave pulse duration. Addressing to the first trap is on the left (a) and to the second trap is on the right (b)

UDC 537.624.9

Interference of spin waves excited by a train of fs-laser pulses in YIG

A.A. Kolosvetov^{1,2}, M.A. Kozhaev², V. I. Belotelov^{2,3,4}, A.I. Chernov^{1,2}

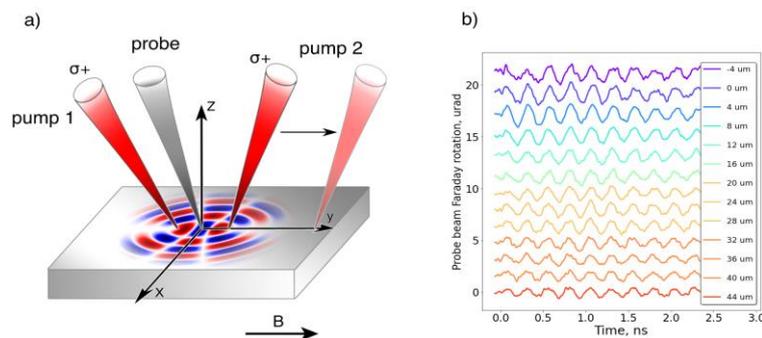
¹ Center for Photonics and 2D Materials, Moscow Institute of Physics and Technology
(National Research University)

² Russian Quantum Center

³ Vernadsky Crimean Federal University

⁴ Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University

Spin waves are promising as Ohmic heating-free information carriers with possible applications in quantum information processing. In particular, recent work has demonstrated an all-magnon switch based on spin-wave interference [1–2]. Another important discovery was an alternative mechanism of ultrafast coherent control of the sample magnetization with circularly polarized femtosecond laser pulses exciting the material in a purely magnetic non-thermal way [3–4].



Pic. 1 a). The scheme of the experiment with two pump beams. The pump and probe beams are focused on the film surface in spots located along the y axis. The center of the probing spot is at zero, the center of the first pumping spot is at -12 μm . The first pump beam and the probing beam are fixed in place, measurements are performed for different values of the second pump beam shift along y axis. b) Experimental data of the probe beam polarization oscillations in time for different values of the second pump beam shift along y axis

This work is devoted to the study of the interference of spin waves excited in a bismuth-substituted yttrium iron garnet (YIG) by sequences of femtosecond laser pulses. We reveal the possibility to manipulate the overall intensity of the spin waves by manipulating the spatial arrangement of the local spin wave sources using a spatial light modulator. Utilizing the YIG as a platform for spin waves interaction provides the lowest known spin-wave damping among other materials, while femtosecond optical excitation of the YIG samples allows us to obtain a system with tunable spin-wave wavelength and wavenumber distribution [5]. We studied

experimentally and numerically the case when the 1.1 um-thick YIG sample is pumped by 200-fs laser pulses, located at different distances relative to each other, at a repetition frequency of 80 MHz. The value of the longitudinal external field was set 89 mT. Within the framework of the pump-probe technique, the oscillations of the Faraday rotation of the probe beam polarization demonstrate the precession of the sample magnetization (pic. 1). The numerical model of our system was constructed in the micromagnetic simulation framework Mumax3 [6].

Results obtained using the simulation corroborate the possibility to utilize spin wave interference to manipulate their propagation pattern. The modelling allowed to reveal the interference of magnetostatic surface spin waves (MSSW) and backward volume magnetostatic spin waves (BVMSW) for different configurations of the external electromagnetic field [7]. The obtained results pave the way for the new approach to the manipulation of spin waves in yttrium iron garnet (YIG) by trains of femtosecond laser pulses. We reveal the possibility to create magnon logical gates by manipulating the spatial arrangement of the local spin-wave sources.

The work was supported by RSF project № 21-12-00316.

Literature

1. Chumak A.V., Serga A.A., Hillebrands B. Magnon transistor for all-magnon data processing // Nat. Commun. 2014. V. 5. P. 4700.
2. Balynsky M., et al. Magnonic interferometric switch for multi-valued logic circuits // J. Appl. Phys. 2017. V. 121. P. 024504.
3. Kimel A.V. et al. Ultrafast non-thermal control of magnetization by instantaneous photomagnetic pulses // Nature. 2005. V. 435, P. 655.
4. Chernov, A.I., Kozhaev, M.A., Belotelov, V. I. Tunable generation of spin waves by ultrashort optical pulses in magnetic dielectric thin films // Optomagnonic structures. Ch. 3. - Singapore: World Scientific Publishing Company Co. Pte. Ltd., 2021. 358. P.
5. Satoh T., et al. Directional control of spin-wave emission by spatially shaped light // Nat. Photonics. 2012. V. 6. P. 662.
6. Vansteenkiste A., et al. The design and verification of MuMax3 // AIP Adv. 2014. V. 4. P. 107133.
7. Chernov A.I., et al. Optical excitation of spin waves in epitaxial iron garnet films: MSSW vs BVMSW // Opt. Lett. 2017. V. 42 I. 2. P. 279.

UDC 535.14

Photon counting statistics of coherent states for distributed dead time

Aleksei Reutov^{4,5}, Denis Sych^{1,2,3}

¹P. N. Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences

²NTI Center for Quantum Communications, National University of Science and Technology MISiS

³Sirius University of Science and Technology

⁴Moscow Institute of Physics and Technology

⁵QRate

Quantum state of coherent photons are substantially used for various research areas of quantum optics and quantum technologies, for example, in modern practical QKD systems [1]. Photon counting statistics is one of the experimental approaches to verify coherent state of light. But various imperfections of the realistic measurements affect the Poisson distribution of photon counts. In particular, dead time leads to sub-Poissonian correction of counting statistics. Here we introduce modification of counting statistics under distributed dead time in the presence of weak coherent states.

Probability function of photon counts under invariable dead-time τ is given [2]:

$$P_k(\lambda, \kappa) = \frac{p_k(\lambda, 1, \kappa)}{1 - \lambda\kappa} + \frac{1}{1 - \lambda\kappa} \int_0^\kappa p_k(\lambda, 1 - y, \kappa) dy,$$

where

$$p_k(\lambda, T, \kappa) = F_{k-1}(\lambda, T, \kappa) - F_k(\lambda, T, \kappa)$$

and $\kappa = \tau/T$; λ, T are mean number of detected photons and measurement time window, $F_k(\lambda, 1, \kappa)$ is cumulative distribution function (CDF). Series expansion [3] for CDF is given:

$$F_k(\lambda, 1 - y, \kappa) = \theta(1 - y - k\kappa) \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(\lambda[1-y-k\kappa])^{k+s+1} (-1)^s}{k+s+1 s!k!}$$

It provides for weak coherent state the series expansion for the probability function $P_k(\lambda, \kappa)$. Averaging over distributed parameter κ due to symbolic computation leads to distributed dead-time modification of photon counting statistics.

The work is supported by Russian Foundation for Basic Research grant 20-32-51004.

References

1. *Hwang W.Y.* 2003 Phys. Rev. Lett. 91(5) 057901
2. *Aleksei Reutov and Denis Sych* 2021 J. Phys.: Conf. Ser. 1984 012009
3. *Bédard G.* 1967 Proceedings of the Physical Society 90 131–141

UDC 535.14

Efficient error correction for quantum secure networks

I. Petrov^{1,2}, N. Borisov², A. Tayduganov^{2,3}

¹Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University)

²QRate

³NTI Center for Quantum Communications, National University of Science and Technology MISiS

Quantum key distribution (QKD) technologies make it possible to implement communication networks, the security of which is ensured by the laws of quantum mechanics. The key distribution process is divided into two main stages: information exchange over the quantum channel and post-processing of the distributed key. The second stage includes the error rate estimation in the quantum channel, error correction in the sifted key, and privacy amplification. This work is aimed to find an error correction algorithm for QKD applications, where expensive components and computational power are concentrated on the receiver node (Bob) while the transmitter node (Alice) is required to be compact and possibly mobile. Such an asymmetric error correction (AEC) scheme also has to provide an optimal balance between high efficiency and low time consumption for correcting one frame.

Our asymmetric error correction procedure is based on the blind information reconciliation concept proposed in [1]. The secret key reconciliation is based on low-density parity-check (LDPC) codes with a frame length of 32000 bit. The procedure implies the rate-adaptive technique with an error rate blindly estimated as an exponential moving average of errors of previously verified frames. Our AEC procedure is also based on the symmetric error correction (SEC) approach [2], which appears to be highly information efficient and failure resistant. The main differences of the AEC approach are the following. First, the decoding process is performed only by Bob. Therefore, Alice does not know the positions of bits with minimum likelihood ratio when the belief propagation decoding fails, so during additional communication rounds, she discloses firstly all punctured bits and only then payload bits (from the key). Second, a new rule about how Alice chooses the number of bits to disclose during one additional round is used – it is proportional to the index number of the current round and quantum bit error rate (QBER) estimated value. Third, the rate-adaptive technique is implemented in the way it provides the fastest linear code rate from an available list.

We study the information efficiency of our error correction method using the (in)efficiency metric f_{EC} and compare it with the symmetric one. The f_{EC} metric is defined as a ratio of information content disclosed during an error correction over information losses in the quantum channel [2]. Figure 1-a represents f_{EC} as a function of average QBER level E . Both asymmetric and symmetric methods start with (in)efficiency 1.15 and increase their f_{EC} values every time an error correction round fails. One can see that the efficiency of AEC approaches values for SEC in E range from 3% to 10%. Meanwhile, the symmetric method still performs more efficiently and stable in the area of low QBERs. That is why AEC is more dependent on LDPC codes construction, which is vulnerable to the linear dependency of its' parity checks. However, our method manages to correct one frame with a fewer average number of iterations than the symmetric method for any error rate (see Fig. 1-b). Note that due to one-side decoding, the asymmetric method has a lower probability to finish error correction for one round. However, AEC discloses all punctured bits at once, so decoding most likely finishes on the second round. Finally, we analyse the secure key ratio r_{sec} considering the finite statistics [3]. Privacy amplification block length is defined as 50 times the error correction frame length. One can observe that our

error correction scheme provides slightly the same secret key ratio in the hole QBER range. All payload data and pulses statistics are generated by the decoy-state BB84 protocol and realistic experimental setup emulator.

In conclusion, the proposed error correction method performs with information efficiency close to the symmetric method while consuming fewer iterations, the same as processor time consumption. We observed, that LDPC based error correction stability highly depends on code construction and decoding algorithms. Nevertheless, our method managed to approach secure key rates that the symmetric method achieves. Still, there are many opportunities for further improvement: more precise QBER estimation will improve EC stability, therefore increasing the secret key rate. The error correction method also needs to be tested on experimentally obtained payload data with pulses statistics.

This work is supported by the Russian Science Foundation under project 17-71-20146.

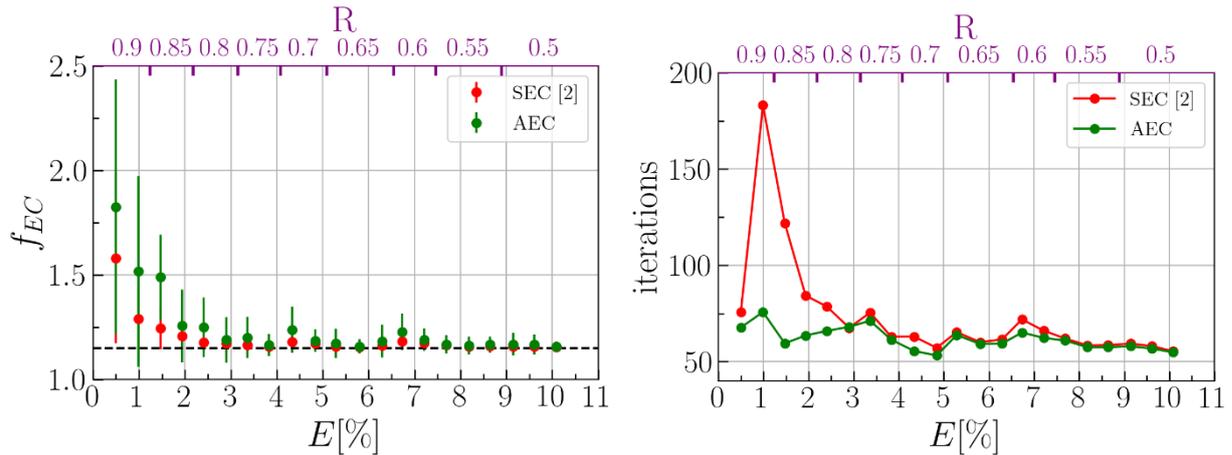


Figure 1. a – Error correction (in)efficiency metric vs average QBER level for both asymmetric and symmetric methods. Horizontal black dashed line represents basic round efficiency $f_{\text{start}} = 1.15$. b – Average number of iterations needed for decoder success vs average QBER level for two error correction methods

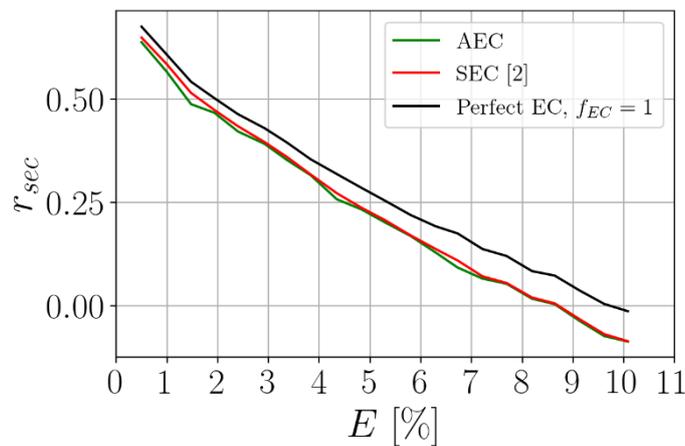


Figure 2. Secret key rate vs average QBER level for both asymmetric and symmetric methods. Black line represents r_{sec} achievable with perfect error correction

Literature

1. Elkouss D., Martinez-Mateo J., and Martin V. Symmetric Blind Information Reconciliation for Quantum Key Distribution // Quantum Inform. Computing, 11(3&4):226–238, 2011.
2. Kiktenko E.O., Trushechkin A.S., Lim C.C.W., Kurochkin Y.V., and Fedorov A.K. Information reconciliation for quantum key distribution // Phys. ReV. Applied, 8:044017, 2017.
3. Trushechkin A.S., Kiktenko E.O., and Fedorov A.K. Practical issues in decoy-state quantum key distribution based on the central limit theorem // Phys. ReV. A, 96:022316, 2017.

Automatic design of multi-qubits systems

A. Kazmina^{1,2}, E. Egorova^{1,2,3}, I. Besedin^{2,3}

¹Moscow Institute of Physics and Technology (national research university)

²National University of Science and Technology MISIS

³Russian Quantum Center

Currently, superconducting qubits are a promising platform for quantum computation. Nevertheless, scientists and engineers have some issues associated with the development of the topology of multiqubit chips. They need to create a scalable quantum system with defined parameters of Hamiltonian on a chip. This issue can be solved by the following method. At the first step, one creates an arbitrary topology of the system, then calculates all the needed parameters and, finally, corrects them by changing the design of the multi-qubit system.

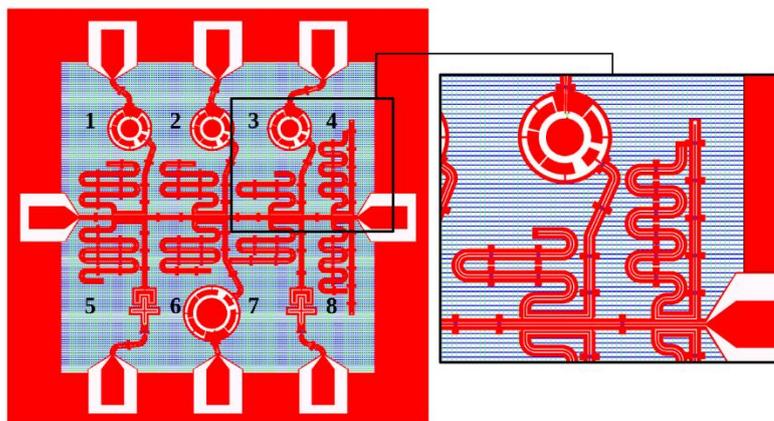


Fig 1. The single-qubit chip with transmission line designed using QCreator contains concentric transmons (1,2,3,7), X-mons (5,6) and resonators (4,8)

In this work, we want to present QCreator: a toolbox for the automated design of systems of superconducting qubits. After the creation of a multi-qubit chip design, QCreator simultaneously maps it into a transmission line model (a set of known lumped elements, e.g. capacitors and inductors). Then, using mathematical methods for the model of lumped elements we can calculate the main parameters of the system:

- capacitance and inductance matrices for multi-conductor coplanar waveguides are obtained by Schwarz-Christoffel mapping method from complex analysis[1],
- scattering parameters (S-parameters) of a system. For simulation of scattering parameters, QCreator calculates boundary condition equation matrix[2] for all systems based on Kirchoff's equations,
- eigenfrequencies, relaxation rates and quality factors of every model presented in the system. These parameters are calculated using dynamic equation matrix,
- energy participation ratios[3] $\frac{E_{elem,i}}{E_{total,i}}$ for all elements of the circuit,
- self-Kerr and cross-Kerr coefficients of Hamiltonian,

$$H = \sum_i \hbar \omega_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \chi_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$$

using the first-order perturbation theory,

- second energy correction to a state n of a system,
- Lagrange function for a transmission line system,
- Hamiltonian of the system in canonical variables $\hat{n}_i, \hat{\phi}_i$.

Using QCreator we implemented and calculated two superconducting qubit designs. The first design is a single-qubits chip with two types of transmons: X-mon and circular transmon, the second is a four qubits

chip with tunable couplings. QCreator is an open-source project for all scientists who are interested in development of superconducting qubits. The library is available from <https://github.com/ooovector/QCreator>.

Literature

1. Wang W., Ma W., Wang Q., Ren, H. (2016). Conformal mapping for multiple terminals. Scientific reports, 6(1), 1-10.
2. Besedin I. and Menushenkov A.P. Quality factor of a transmission line coupled coplanar waveguide resonator. EPJ Quantum Technology 5.1 (2018): 1-16.
3. Minev Z.K., Leghtas Z., Mundhada S.O., Christakis L., Pop I.M., Devoret M.H. Energy-participation quantization of Josephson circuits.

UDC: 53.06

Simulation of ion dynamics in Surface Electrode Trap

Artem Podlesnyy^{1,2}, Yelnury Suleimen^{1,2}, Kirill Lakhmanskiy²

¹Moscow Institute of Physics and Technology

²Russian Quantum Center

Surface Electrode Traps (SETs) have proven to be the promising way for scaling an ion-based quantum computer. They provide great flexibility of the trapping potential for trapping and shuttling short ion crystals. In array-like architecture with communication between traps, it may be possible to achieve sufficient qubit scaling. In this work, we present a wide set of tools for simulating SETs with large chains of ions. This work will be used for future experimental implementation and analysis of planar traps.

On figure 1 a picture of a five-wire surface trap is shown. Two rf-lines depicted blue, confine ions radially. Side DC-electrodes labelled as «t [1]» and «b [1]», are used to confine trapped ions axially and to control the shape of the trapping region. Due to the potential applied by side electrodes, the ion position is different from the rf-potential null, which leads to excess noise. Thus, central DC-electrode labelled «c», is used to compensate for this minimum shift.

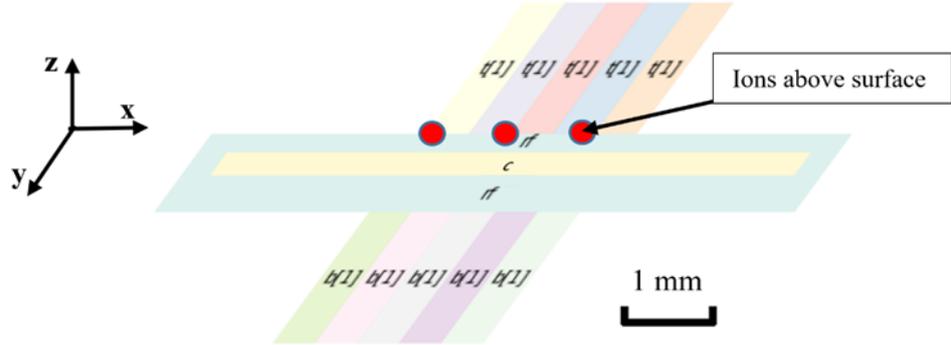


Figure 1: Schematic picture of SET.

Trap parameters: peak rf-voltage $V_{rf} = 540$ V, RF frequency $\Omega_{rf} = 47 \times 2\pi$ MHz

Potential above the surface of SET can be described with the following equation ^[1]:

$$\psi(x, y, z, t) = Q \sum_{i=1}^{N_{dc}} \phi_i^{dc}(x, y, z) + Q \sum_{i=1}^{N_{rf}} \phi_i^{rf}(x, y, z) \cos(\Omega_{rf} t), \quad (1)$$

where Q – ion charge, $\phi_i^{dc/rf}$ – potential from an i^{th} electrode, Ω_{rf} – RF-frequency of the trap, and $N_{dc/rf}$ – a number of electrodes. To simulate the potentials of the electrodes we use the solution for the rectangular electrode boundary condition:

$$\phi_i^{dc/rf}(x, y, z) \times \frac{2\pi}{V_i} = \tan^{-1} \left[\frac{(y_{i2} - y)(x_{i2} - x)}{z\sqrt{z^2 + (y_{i2} - y)^2 + (x_{i2} - x)^2}} \right] - \tan^{-1} \left[\frac{(y_{i1} - y)(x_{i2} - x)}{z\sqrt{z^2 + (y_{i1} - y)^2 + (x_{i2} - x)^2}} \right] - \tan^{-1} \left[\frac{(y_{i2} - y)(x_{i1} - x)}{z\sqrt{z^2 + (y_{i2} - y)^2 + (x_{i1} - x)^2}} \right] + \tan^{-1} \left[\frac{(y_{i1} - y)(x_{i1} - x)}{z\sqrt{z^2 + (y_{i1} - y)^2 + (x_{i1} - x)^2}} \right], \quad (2)$$

where $y_{i1}(x_{i1})$ and $y_{i2}(x_{i2})$ are coordinates of two opposite corners of the i^{th} electrode, V_i – voltage of the electrode.

The result of the simulation for the SET (figure 1) is shown on figure 2. Voltages, applied to DC electrodes are optimized for given RF parameters using the Surface Pattern python package ^[2, 3]. As a result, from the simulation were obtained parameters, defining surface trap (Table 1).

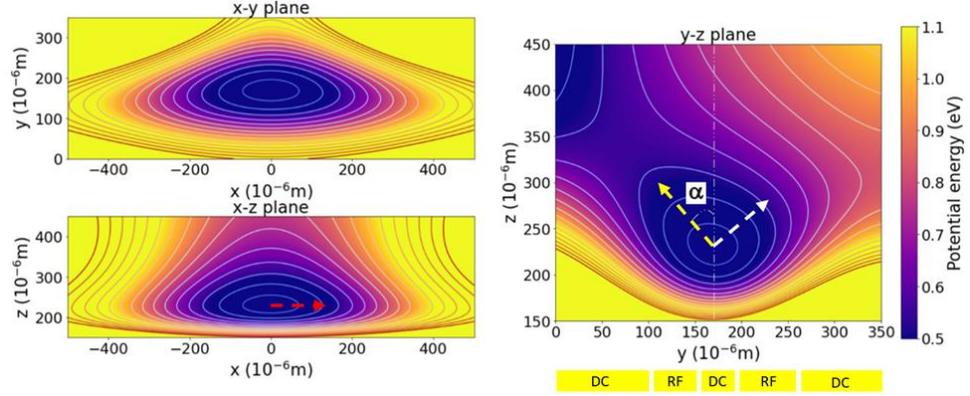


Figure 2: Total effective potential for the cross-sections through the trap minimum: $[7.89\text{e-}5, 170, 230]$ μm . A rotation of the pseudopotential is achieved by the asymmetry of the voltage distribution of the SET. Dashed lines show directions of motional modes

Table 1: Main parameters, defining SET for a single ion

<i>Trap depth</i>	<i>Secular frequencies</i>	<i>Directions on figure 2</i>
0.19 eV	0.8929 MHz	Red
Ion height	2.296 MHz	Yellow
230 μm	2.878 MHz	White

The laser-cooled ions crystalline states, which is a promising structure to implement quantum computing ^[4]. It is necessary to be able to work with many ions in the SET. The main result of this work is integrating the molecular dynamics simulation method with surface trap geometry, to simulate the classical evolution of several ions in the traP.

For N ions confined in SET, the total potential energy is given by

$$\psi_T = \sum_{j=1}^N \psi(x_j, y_j, z_j, t) + \sum_{j_1=1}^N \sum_{j_2>j_1}^N \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_{j_1} - \vec{r}_{j_2}|}, \quad (3)$$

where $r_{j_{1/2}}$ – radius-vectors of respecting ions. For simulation, the Lion package ^[5] is used. On figure 3, the simulated crystal is shown. As a potential, the same trap mentioned before was used.

To conclude, this simulation can be used to analyze the classical evolution of ions in surface electrode trap, which is a key to the future experimental realization of a quantum computer with a high number of qubits. Using this tool, we are going to implement several tasks, such as measuring the temperature of several ions, normal modes for Coulomb crystals, stability region for several ions and sympathetic cooling.

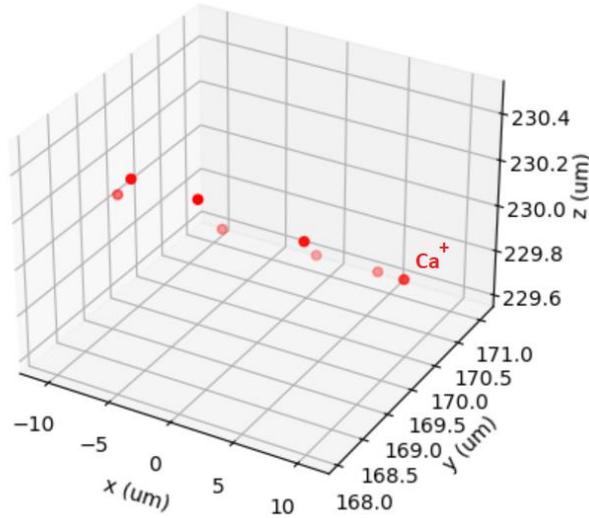


Figure 3: Evolution of 8 Ca⁺ ions in SET

References

1. House M.G. Analytic model for electrostatic fields in surface-electrode ion traps. Phys. Rev A.78, 033402 (2008).
2. Jördens R. Numerical tools for rf ion traps (2016).
3. Roman Schmied et al. Optimal Surface-Electrode Trap Lattices for Quantum Simulation with Trapped Ions. Physical Review Letters 102:233002 (2009).
4. Yan L.L. [et al] Exploring structural phase transitions of ion crystals, Sci. ReP. 6,21547(2016).
5. Bentine E. [et al] (py)LIon: a package for simulating trapped ion trajectories (2019)

UDC 530.145

Generalized Toffoli gate decomposition on superconducting and trapped-ion-based qutrits

A.S. Nikolaeva^{1,2}, E.O. Kiktenko^{1,2,3}, A.K. Fedorov^{1,2}

¹Moscow Institute of Physics and Technology
(National Research University)

²Russian quantum center

³Steklov Mathematical Institute of Russian Academy of Sciences

The high error rate that occurs during computation is now one of the challenges that arise in the practical implementation of quantum algorithms. The imperfection of performing two-qubit operations, including those conducted during the decomposition of multi-qubit gates into one-qubit and two-qubit operations, contributes to the errors significantly. The decomposition of a generalized Toffoli gate, to which numerous multi-qubit operations are reduced, is the subject of this study.

A promising way to reduce the number of two-qubit operations in generalized Toffoli gate decomposition is to use the upper levels of multi-level quantum systems – qudits [1]. From an experimental point of view, the most accessible dimension is $d = 3$ that corresponds to the so called qutrit. Qutrits have been demonstrated experimentally in superconducting systems [2] and systems based on ultra-cold ions caught in traps [3]. Each of these platforms has its own characteristics that have to be taken into account when decomposing multi-qubit operations into one-qubit and two-qubit operations.

The main advantage of the trapped-ion-based platform is all-to-all qudits connection topology, which allows to perform two-qudit operation between any pair of qudits in the system. Native gates for this platform are two-qudit $XX(\chi)$ gate and single-qubit gates $R_{m,n}(\varphi, \theta)$, given in the general case as follows:

$$XX(\chi) = e^{-i\sigma^{(0,1)}_x \otimes \sigma^{(0,1)}_x \chi},$$

$$R_{m,n}(\varphi, \theta) = e^{-i\left(\sigma^{(m,n)}_x \cos\varphi + \sigma^{(m,n)}_y \sin\varphi\right) \frac{\theta}{2}},$$

where $\sigma_x^{(m,n)} = |m\rangle\langle n| + |n\rangle\langle m|$, $\sigma_y^{(m,n)} = -i|m\rangle\langle n| + i|n\rangle\langle m|$, and $\{|k\rangle\}_{k=0}^2$ are vectors of the computational basis. Using native qutrit gates of the ion platform, the N -qubit Toffoli gate can be implemented using $2N - 3$ gates $XX(\pi/2)$ (see Fig. 1a).

In contrast to ion platforms, superconducting platforms usually have a cellular or grid qutrit connection topology. Two types of interaction are characteristic of superconducting platforms: $iSWAP_{02}$, corresponding to the transition $|11\rangle \rightarrow -i|02\rangle$, and $iSWAP_{20}$, corresponding to the transition $|11\rangle \rightarrow -i|20\rangle$, and two-qutrit gate $CPHASE$. Using a certain combination of these two-qubit gates together with single-qubit operations makes it possible to decompose an N -qubit Toffoli gate using $2N - 3$ two-qubit gates for all possible qutrit connection topology (see Fig. 1b).

Thus, it is shown, that the use of the qutrit's upper level makes it possible to implement an N -qubit Toffoli gate using $2N - 3$ two-qutrit gates with an arbitrary qutrit's connection topology in superconducting and trapped-ion-based platforms.

The research is supported by the Russian Science Foundation (Grant N 20-42-05002; the general theoretical framework) and Leading Research Center on Quantum Computing (Agreement N 014/20; compilation and optimization methods).

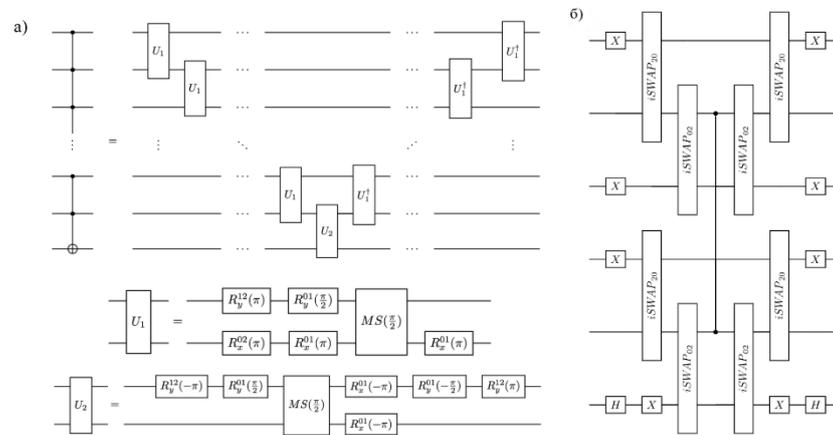


Fig. 1. a) Generalized Toffoli gate decomposition for trapped-ion-based qutrits. b) 6-qubit Toffoli gate decomposition for superconduction qutrits with cellular topology.

Literature

1. Kiktenko E.O., Nikolaeva A.S., Xu P., Shlyapnikov G.V., Fedorov, A.K., Scalable quantum computing with qutrits on a graph // Phys. Rev. A. 2020. V. 101, N.2 P. 022304.
2. Fedorov A., Steffen L., Baur M., da Silva M.P., Wallraf A., Implementation of a Toffoli gate with superconducting circuits // Nature. 2012. V. 481, N.7380 P. 170-172.
3. Senko C., Richerme P., Smith J., Lee A., Cohen I., Retzker A., Monroe C., Realization of a quantum integer-spin chain with controllable interactions // Physical Review X. 2015. V. 5., N.2. P. 021026.

UDC 538.91

Currents of topological marker in dynamically controlled Chern Insulators

D.B. Golovanova¹², A.R. Yavorsky¹², A.A. Markov¹, A.N. Rubtsov¹³

¹Russian Quantum Center

²Moscow Institute of Physics and Technology

³Lomonosov Moscow State University

Topological matter is famously hoped to provide quantum technologies with a so much desired stability [1-3]. The idea dates back to the explanation [4] of robust quantization of the Hall conductivity due to its connection to a topological invariant, called the Chern number. It is a global characteristic of a sample defined in momentum space. Therefore, if one wishes to characterize inhomogeneous systems it is necessary to transfer these invariants to the real space and make them somewhat local, as Kitaev [5] and Bianco and Resta [6] have

done. These quasi-local characteristics are coined «topological markers» in the literature. An interesting question is how these markers can help in understanding the dynamics of topological systems. Caio M.D. et al. in [7] described the destruction of a topological phase via currents of local markers spreading through the sample.

In our work, we studied the possibility to dynamically control the position of a topologically nontrivial area inside a finite 2-d Chern insulator sample. We suggested a new perspective on the dynamics of local topological markers. This approach allowed us to explicitly introduce the local currents of the marker and track its propagation over the sample.

The starting point of our approach is a local version of the Streda-Widom formula, which connects the Chern marker c and density response \mathbf{n} to a uniform magnetic field \mathbf{B} [8]. We defined the local Chern marker out of equilibrium by the following equation:

$$c(\mathbf{r}, t) = \left. \frac{\partial \mathbf{n}(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{B}} \right|_{\mu} \quad (1)$$

Using the definition, we analysed a shift of the borders between topological and trivial phases. The top of fig. 1 shows electric currents before and after shifting; in such a way we can detect the transferring of the topological region on one site. The strip on the bottom of fig. 1 shows how the marker (1) distribution changes during the process. Thus, the local marker correctly indicates the regions in different phases.

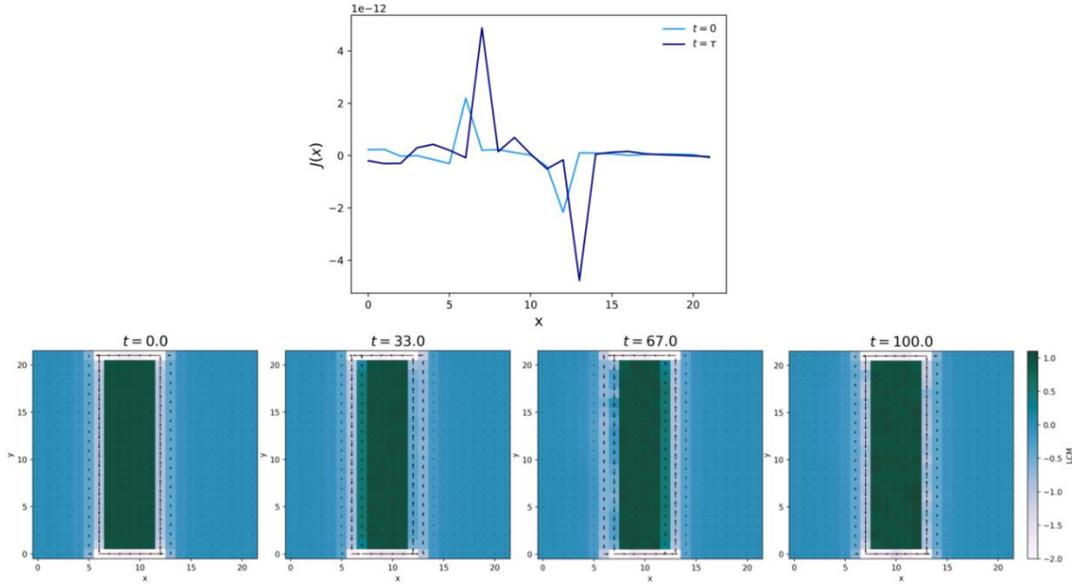


Fig. 1. The movement of the «topological» area inside the Chern insulator in the trivial phase

The advantage of our approach is its explicit physical meaning and ease of measurement. In addition, we can define local marker currents from (1) and the continuity equation:

$$\mathbf{J}^c(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathbf{J}^e(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{B}}, \quad (2)$$

where $\mathbf{J}^c(\mathbf{r}, t)$ – local topological marker currents on the lattice. One of the main advantages of our currents is that they satisfy the lattice continuity equation. This is not the case for a previously adapted version of time-dependent Chern marker [9]. Most clearly it can be seen in a following setting. Forbidding an electron hopping from a selected site, we also turn off the currents of any local quantity from it. Fig. 2 shows a comparison of two approaches on dynamics of the marker: our and proposed in [9] in such a scenario: the central site was «cut off» from the lattice. Thus, our approach allows to think of the local marker as a charge and describe its dynamics in terms of local currents.

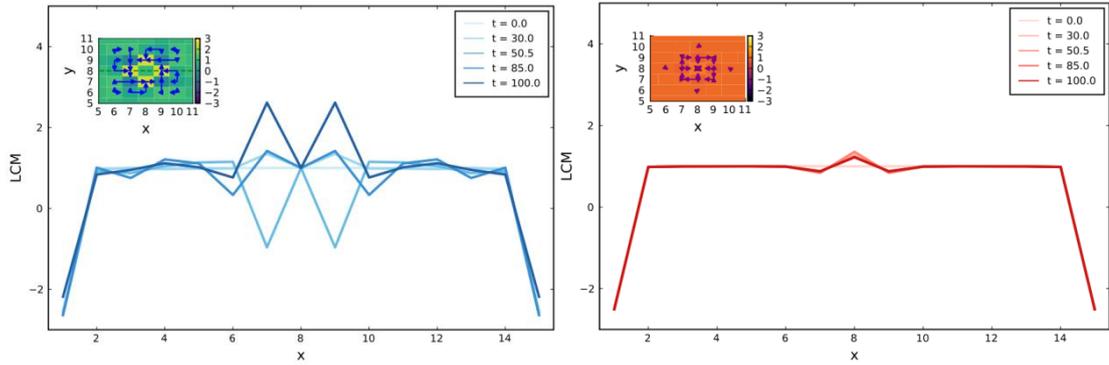


Fig. 2. The dynamics of local Chern marker (LCM) under quench perturbation which isolates a single site in the sample's middle. The insert shows the behaviour of LCM currents around this site

References

1. Zhang T. *et al.* Experimental demonstration of topological surface states protected by time-reversal symmetry // *Physical Review Letters*. 2009. T. 103. № 26. C. 266803.
2. Gilbert M.J. Topological electronics // *Communications Physics*. 2021. T. 4. № 1. C. 1-12.
3. Freedman M. *et al.* Topological quantum computation // *Bulletin of the American Mathematical Society*. 2003. T. 40. № 1. C. 31-38.
4. Thouless D.J. *et al.* Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential // *Physical review letters*. 1982. T. 49. № 6. C. 405.
5. Kitaev A. Anyons in an exactly solved model and beyond // *Annals of Physics*. 2006. T. 321. № 1. C. 2-111.
6. Bianco R., Resta R. Mapping topological order in coordinate space // *Physical Review B*. 2011. T. 84. № 24. C. 241106.
7. Cao M.D. *et al.* Topological marker currents in Chern insulators // *Nature Physics*. 2019. T. 15. № 3. C. 257-261.
8. Bianco R., Resta R. Orbital magnetization as a local property // *Physical review letters*. 2013. T. 110. № 8. C. 087202.
9. Privitera L., Santoro G.E. Quantum annealing and nonequilibrium dynamics of Floquet Chern insulators // *Physical Review B*. 2016. T. 93. № 24. C. 241406.

УДК 538.945

4-qubit chip with tunable coupling

E.U. Egorova^{1,2,3}, *I.A. Tsitsilin*⁶, *A.S. Kazmina*^{2,3}, *I.S. Besedin*^{1,2},
*A.N. Bolgar*³, *D.A. Kalacheva*^{1,3,5}, *A.V. Ustinov*^{1,2,4}

¹Russian Quantum Center

²National University of Science and Technology MISIS

³Moscow Institute of Physics and Technology

⁴Karlsruhe Institute of Technology

⁵Skolkovo Institute of Science and Technology, Skolkovo Innovation Center

⁶Walther-Meißner-Institute, Bavarian Academy of Sciences and Humanities

Superconducting qubits are a promising platform for scalable quantum computers. For example, some circuits are able to simulate an academic problem in 200 seconds, for which a classical computer would take at least 2.5 days [1]. With experimentally feasible quantum error correction [2] it should be possible to build a superconducting quantum processor.

We present a chip that is potentially suitable for creating a 4-qubit quantum processor. The chip features 4 concentric transmon qubits [3] with individual readout resonators and 4 tunable couplers. Each resonator is coupled in reflection geometry to a transmission line through an individual Purcell filter. The design has several novelties (see Fig. 1). The first one is variable coupling between concentric qubits via tunable bus [4, 5], which in our case is a multimode coupler with the first mode being tunable. By setting magnetic flux in the coupler to a certain value, the interaction between qubits can be switched off. The next feature is concentric qubits that have an additional Josephson junction connected to the SQUID. It allows narrowing the frequency range for diminishing flux noise. Finally, flux bias lines are connected directly to the SQUIDs without any inductive dividers. It allows to significantly reduce the required current and flux crosstalk. An optical photograph of the chip is shown in Fig. 2. There are two versions of the chip design. The second one has Purcell

filters and resonators that are wider distributed on the chip. Moreover, it has modified coupler and fixed arrangement of Josephson junctions in the qubit.

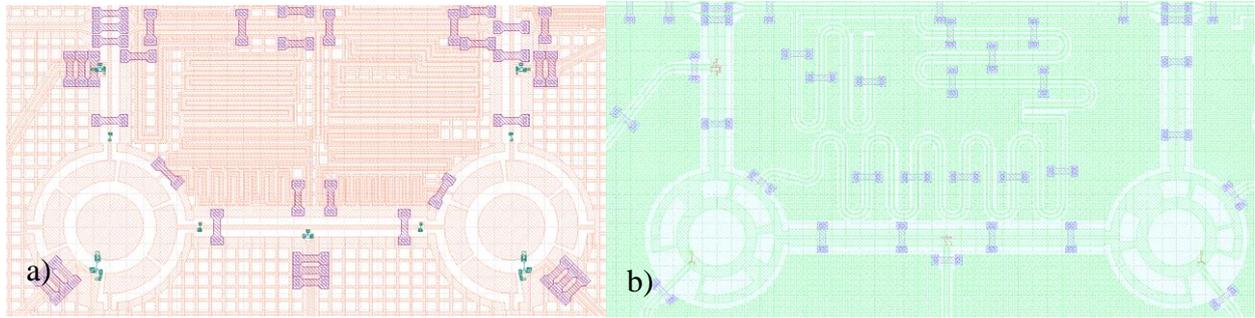


Figure 1: Fragments of two chip designs. a) From top to bottom: reflection line, 2 Purcell filters, 2 readout resonators, and concentric qubit pair connected via the tunable coupler. b) From top to bottom: reflection line, Purcell filter, readout resonator, 2 concentric qubits connected via a modified tunable coupler

UDC 53.06

Classical sympathetic cooling simulation of mixed species trapped ion chains

Sterligov N.A., Lakhmanskaya O.Y., Akopyan L.A., Lakhmanskyy K.E.

Russian Quantum Center

In the present work, we examine the cooling dynamics of the ion crystal comprised of $^{40}\text{Ca}^+$ and ancilla ion in the linear Paul trap. The cooling of ancilla ions with mass 43 a.m.u. were modelled by viscous damping force proportional to the ions velocity $\vec{F}_i = -\gamma\vec{v}_i$, whereas the calcium ions were cooled sympathetically.

The simulation of ion motion in a trap was numerically integrated with methods of molecular dynamics using the package (py)Lion [1]. An algorithm was developed that allows simulating an ion crystal with the arbitrary set of normal modes [2]. We present the results in the pseudopotential approximation, i.e. radiofrequency oscillations are neglected. However, we also plan to investigate the effect of the micromotion since the package allows using time dependent potential too. Expression below represents the potential experienced by the ion i in an ion chain:

$$V = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} (\omega_{ir}^2 x_i^2 + \omega_{iy}^2 y_i^2 + \omega_{ia}^2 z_i^2) + \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{d_{ij}}$$

$$\omega_{ir} = \frac{\Omega}{2} \sqrt{a \frac{M}{m_i} + \frac{1}{2} \left(q \frac{M}{m_i} \right)^2}, \omega_{ia} = \frac{\Omega}{2} \sqrt{-2a \frac{M}{m_i}}.$$

Here m_i – mass of an ion, $M = 40$ a.m.u., N – number of ions, – radial and axial secular frequencies of the trap respectively for the ion i , e – electron charge, d_{ij} – distance between i, j ions, ϵ_0 – vacuum permittivity, $\Omega = 6\text{MHz}$ – is a radio frequency applied to the trap, $a = 0.6, q = -0.0007$ – are corresponding coefficients in Mathieu equations considering the axial symmetry. The initial ion temperature was set to 0.1 K and the final one we approximated with the Doppler limit roughly equal to 1mK while the cooling rate for ancilla was $10^{-6} \frac{1}{s}$. The temperature of the ions was evaluated in terms of the averaged kinetic energy of the selected ions.

We started our research from the five $^{40}\text{Ca}^+$ ions in the middle of the chain and two ancilla ions on the edges. The normal mode eigenvectors for the chain are shown in the fig.1. Due to a strong amplitude mismatch shown in this figure, we expect the lowest cooling rate for the 4th ion and the highest cooling rates for the 2nd and the 6th ions. This was further proven by dynamic simulation of the rate shown in fig.2. For the same reason axial motion is prone to sympathetic cooling more than the radial one: for the radial motion only the first two modes are appropriate for sympathetic cooling while for the axial one there are at least four latest

modes that have considerable impact on cooling the crystal [3]. Further, we investigated the influence of the asymmetric configurations on the cooling rate, namely we modeled the dynamics of the ion string (40 40 40 40 40 43 43). The asymmetry allows not only to efficiently cool all the ions in axial direction but also to significantly increase the cooling rate and to reduce the saturation temperature in the radial direction (see fig. 2).

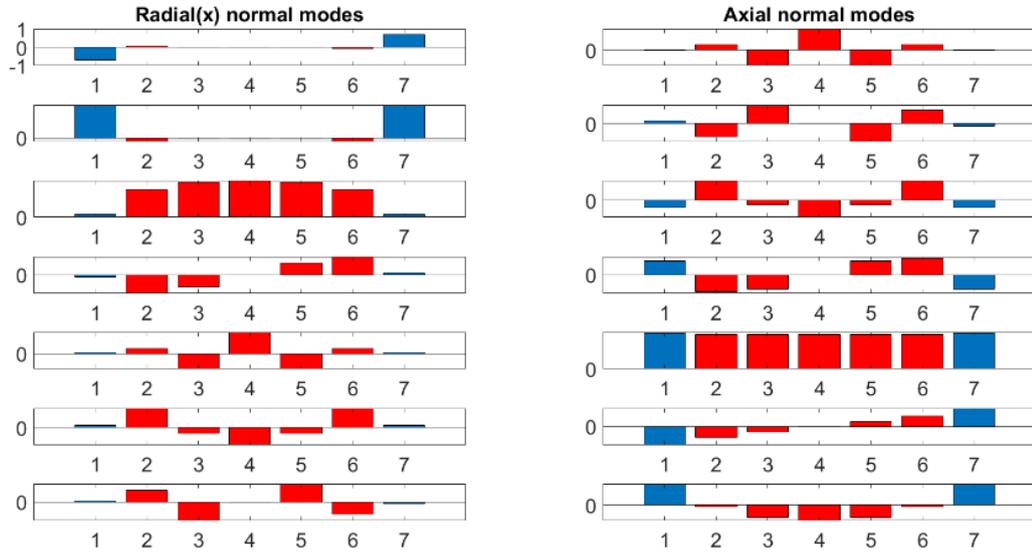


Fig. 1. schematic structure of radial (left) and axial (right) normal modes for symmetric string configuration (43 40 40 40 40 43 43)

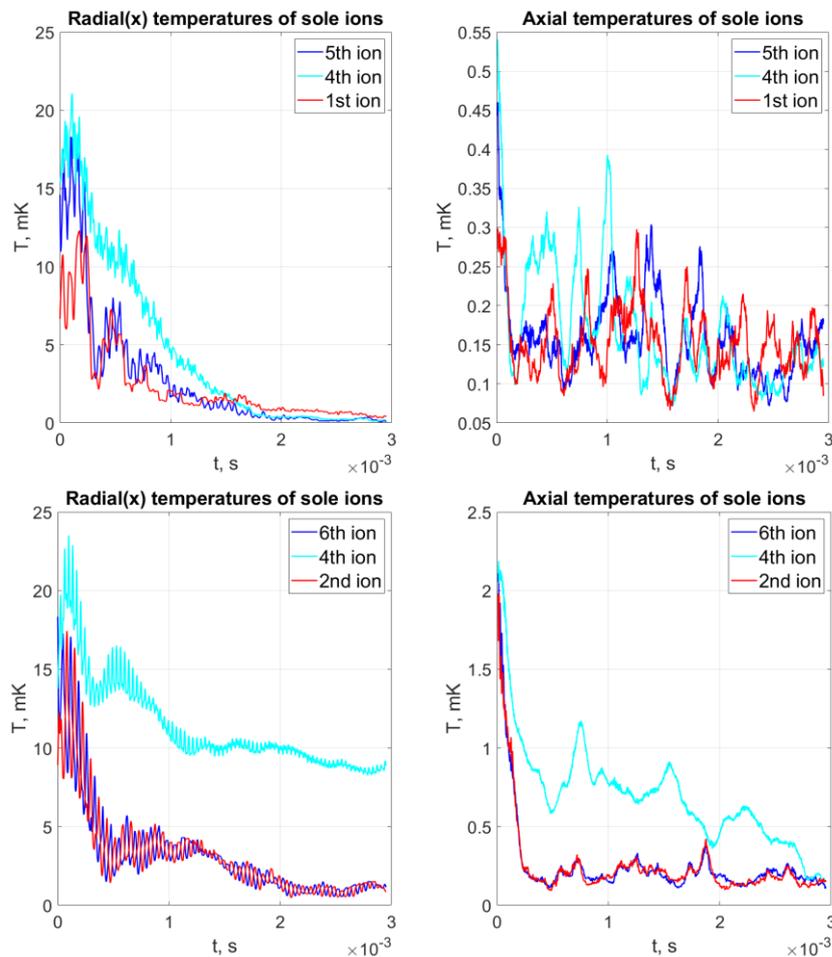


Fig. 2. the upper figures show the temperatures of ions in symmetrical configuration (43 40 40 40 40 43 43); the lower figures show the temperature of ions in asymmetrical configuration (40 40 40 40 40 43 43)

We have also investigated the influence of the trapping parameters on the cooling speed and found the most stable trapping parameters in respect to the ion hopping at elevated trap temperatures. The latter is relevant for the mixed species traps when collisions with residual backroad gasses may cause the local heating of the chain and the eventual hop of the ion. We found that at $a = 0.6, q = -0.0007$ the ions keep their positions unchanged with the temperatures up to 1K.

References

1. *Bentine E., Foot C.J., Trypogeorgos D.* (py)Lion: A package for simulating trapped ion trajectories // *Computer Physics Communications*. 2020. V. 253, 107187.
2. *James D.F.V.* Quantum dynamics of cold trapped ions with application to quantum computation // *Appl. Phys. B*. 1998. V. 66. P. 181.
3. *Sosnova K., Carter A., Monroe C.* Character of motional modes for entanglement and sympathetic cooling of mixed-species trapped-ion chains // *Phys. Rev. A*. 2021. V. 103. Iss. 1.

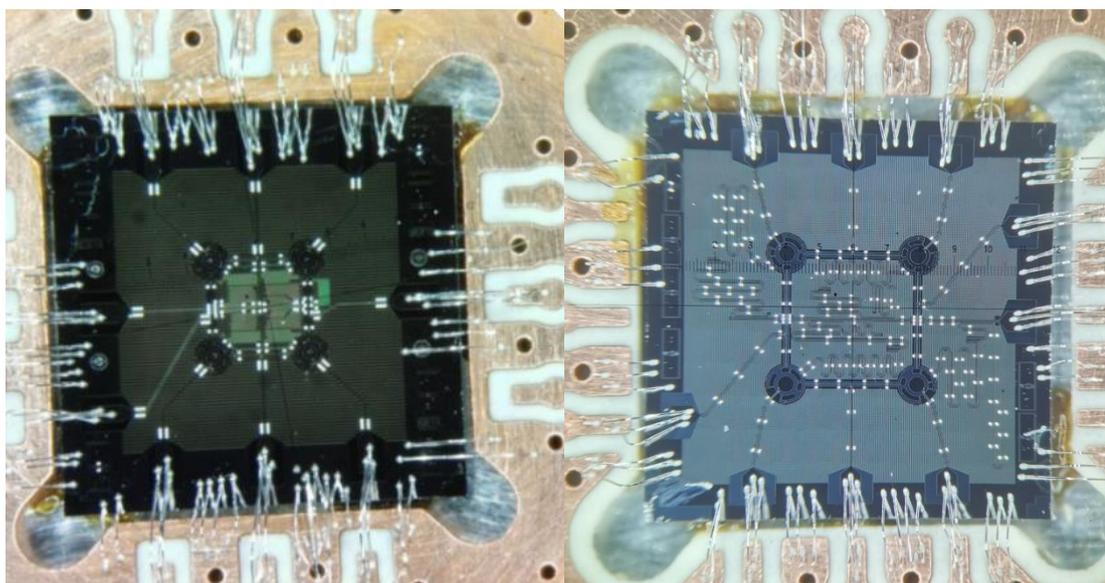


Figure 2: Photograph of two 4-qubit chip versions in the sample holder. The chip sizes are 5mm x 5mm. Our first experimental results include spectroscopy and time-domain measurements of the first chip. Obtained relaxation times show enhanced decay of the qubit excitation through the inductively coupled flux bias line because of the dependence on the orientation of asymmetric SQUID to the flux bias line. The measurements of the second chip with the modified design are now in progress. Both samples were fabricated using the equipment of MIPT Shared Facilities Center

Литература

1. *Pednault E., Gunnels J., Maslov D. and Gambetta J.*, On ‘Quantum Supremacy’. Tech. reP. IBM. -2019.
2. *Gong M. et al.* Experimental exploration of five-qubit quantum error correcting code with superconducting qubits // arXiv preprint arXiv:1907.04507. 2019.
3. *Braumüller J. et al.* Concentric transmon qubit featuring fast tunability and an anisotropic magnetic dipole moment // *Applied Physics Letters*. 2016. T. 108. № 3. C. 032601.
4. *McKay D.C. et al.* Universal gate for fixed-frequency qubits via a tunable bus // *Physical Review Applied*. 2016. T. 6. № 6. C. 064007.
5. *Mundada P. et al.* Suppression of qubit crosstalk in a tunable coupling superconducting circuit // *Physical Review Applied*. 2019. T. 12. № 5. C. 054023.

Fluctuating local field method for the Ising model with arbitrary couplings

Kuznetsova D.V.^{1,2}, *Astretsov G.V.*^{1,3}, *Rubtsov A.N.*^{1,3}

¹ Russian Quantum Center

² Moscow Institute of Physics and Technology

³ Lomonosov Moscow State University

Properties of the systems with quenched disorder drew attention for the last several decades and has recently been publicly recognized with the 2021 Nobel prize awarded «for the discovery of the interplay of disorder and fluctuations» [1]. It has also been shown that many optimization problems could be formulated in terms of the Ising model on a certain graph [2]. Many modern optimization methods rely on the mean field annealing and cannot be fully trusted, because they rely heavily on the existence of a well-defined order parameter and do not take into account fluctuations.

We present a simple method which takes into account non-local fluctuations of the zero mode and has the same complexity as the mean field method. It gives reasonable results for mid-sized systems and is applicable for the cases where exact solution is numerically unreachable and the mean field method produces incorrect answers due to strong fluctuations.

The method uses the idea of the Fluctuating Local Field [3, 4] approach, in which the actual Ising model (Eq. 1) is replaced by a variational problem (Eq. 2), which could be easily solved by applying the Hubbard-Stratonovich transformation.

$$E = \sum_{i,j=1}^N J_{ij} s_i s_j - \sum_{i=1}^N h_i s_i, \quad (1)$$

where s_i is a spin variable and N is the number of spins in a system.

$$E_{FLF} = -\left(\sum_{i=1}^N f_i s_i\right)^2 - \sum_{i=1}^N h_i s_i, \quad (2)$$

where f_i are real variational parameters, whereas h_i are the same as in the Eq. (1).

Variational parameters f_i can be found from the self-consistency equation which follows from the minimum of the Gibbs free energy. In our case the FLF equations are applied for the case where there is no prior knowledge of the channel with instability. The complexity of the method scales linearly with the number of sites, which is comparable with the mean-field method. Possible direction for the future research is the application of the method to quantum systems with strong non-local fluctuations or disorder.

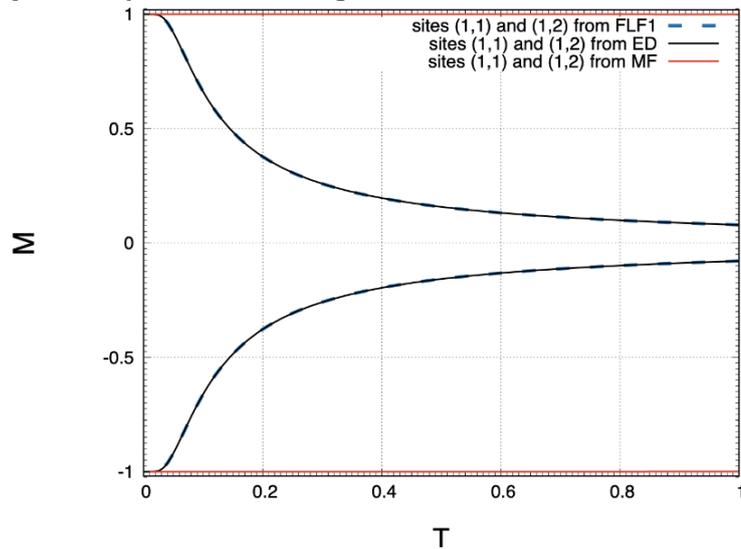


Fig. 1. Dependence on temperature of the on-site magnetization for two neighboring sites of a 4x4 cluster with nearest neighbor antiferromagnetic interaction $J = 1$, found by three methods: FLF (blue dashed), exact (black), and mean field (red)

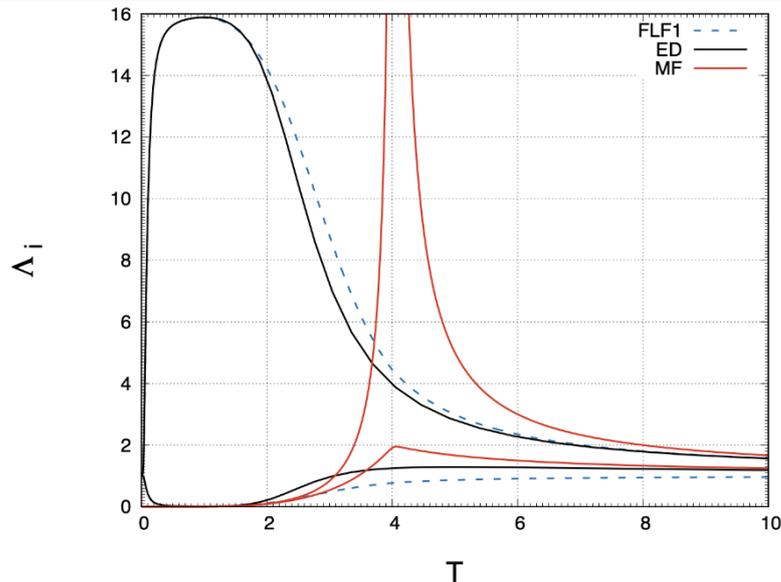


Fig. 2. Dependence on temperature of the two greatest eigenvalues of the spin susceptibility matrix for a 4x4 cluster with nearest neighbor antiferromagnetic interaction $J = 1$, found by three methods: FLF (blue dashed), exact (black), and mean field (red)

References

1. Mézard, M, Parisi G., and Virasoro M.A. Spin glass theory and beyond: An Introduction to the Replica Method and Its Applications. World Scientific Publishing Company, 1987, V. 9.
2. Lucas, A. Ising formulations of many NP problems. Frontiers in physics, 2014, V. 2, 5.
3. Rubtsov, A.N. Fluctuating local field method probed for a description of small classical correlated lattices. Physical Review E, 2018, V. 97.5, 052120.
4. Rubtsov, A. N., Stepanov E.A., and Lichtenstein A.I. Collective magnetic fluctuations in Hubbard plaquettes captured by fluctuating local field method. Physical Review B, 2020, V. 102.22, 224423.

UDC 535

Detection of fluorescence from ablated ${}^9\text{Be}$ for future implementation in a Penning trap

A. Zhuravlev¹, T. Sägerser², S. Jain,² P. Hrmo², J. P. Home²

¹Moscow Institute of Physics and Technology
(National Research University)

²Institute for Quantum Electronics, ETH Zürich

In this paper we present an alternative technique of producing neutral atoms using ablation for future implementation in a surface Penning trap in order to perform quantum computing and simulation with ${}^9\text{Be}^0$ ions. The experimental scheme of the ablation process has been developed and assembled, including a required vacuum-optical system for obtaining an atomic beam and observing its fluorescence.

Photo-ionization of neutral beryllium occurs on the $2s^2\,{}^1S_0 \rightarrow 2s2p\,{}^1P_1$ transition near the wavelength of 235 nm [1]. We used Toptica diode laser at 470 nm which is frequency doubled to 235 nm through a nonlinear crystal. The PI laser power varied from 1.5 to 2.5 mW. Throughout the experiment we kept the laser in a single mode operation. The laser beam goes straight through the atomic beam photo-ionizing it and is aligned with the top of the needle which is installed in the observation point like a marker of the right direction. A lens with $f = 35$ mm is installed inside the vacuum chamber and collimates the fluorescence light passing through it. Then the light passes through a UV bandpass filter and focuses on a PMT with a lens with $f = 50$ mm.

The ablation target is a beryllium wire (1.2 mm in diameter) installed inside the vacuum chamber which is an aluminum chamber with three windows pumped out to a pressure $3 - 4 \times 10^{-6}$ mbar using a turbo-molecular pump. In addition to the ablation target the chamber also has a classical resistively heated oven which is surrounded by a shield with vertical holes and located exactly above the needle. This allows us to use evaporated atoms to check the proper operation of the detection system.

For the 532-nm Q-switched Nd:YAG ablation pulsed laser used in the future setup the operating modes were studied in detail and the necessary parameters were found to achieve the required characteristics of the laser beam. Since we want to ablate using the least amount of laser power, we need to focus the laser beam making the beam size commensurate with the size of the ablation target. For this purpose, we use a lens with a focal length $f = 200$ mm. Due to the non-trivial searching the magnitude of the pulsed laser waist using a beam profiler we applied the knife-edge method. The beam power $P(x, z)$, detected by the photodiode as a function of knife-edge's transverse position x and axial position z is obtained by integrating the Gaussian beam irradiance profile over all y and the unobstructed range of x . The result is:

$$P(x, z) = p(z) \int_x^{\infty} \exp\left[-\frac{(\xi - x_0)^2}{w^2(z)}\right] d\xi = \frac{P_0}{2} \operatorname{erfc}\left[\frac{\sqrt{2}(x - x_0)}{w(z)}\right],$$

where a waist radius is given by

$$w(z) = w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{M^2 \lambda (z - z_0)}{\pi w_0^2}\right)^2} = w_0 \sqrt{1 + \left(\theta \frac{(z - z_0)}{w_0^2}\right)^2},$$

and w_0 is a waist radius in the focus, z_0 is the focus distance of the lens and M^2 is a beam quality factor that represents the degree of variation of a beam from an ideal Gaussian beam.

We found the following values: $w_0 = 276 \pm 8$ μm , $z_0 = 20.1 \pm 0.1$ cm and $M^2 = 10.65 \pm 0.06$.

The majority of the experiment with the exception of adjustment and manual parameter changes was carried out remotely. In order to control the pulsed laser and acquire data automatically, we wrote a Python script. It allows us to operate the laboratory equipment through a control software implemented in C++. A trigger pulse is sent from the DDS board to the flash lamp in the laser head, through the TTL trigger pulse. After a latency of around 140 μs , the laser pulse will be emitted. Then we detect the fluorescence signal from the PMT within a detection window of 2 μs . After that we need to wait 100 ms before the next experiment due to the low limit of the laser's repetition rate.

Here we describe the ablation experiments that were performed. Using the written Python script, we will scan the PI laser frequency near the resonant one ($f_0 = 638\,040\,044$ MHz) in the blue shifted side. Since we want to analyze the behavior of atoms with different velocities we will acquire data for different waiting time ranging from 140 to 250 μs at every frequency step. We will make several measurements with different power settings of the 532 nm laser to find the minimum of required energy. One of the obtained results is shown in Fig. 1 with an overlaid theoretical Doppler shift curve

$$f_{\text{obs}} = f_{\text{lab}} \left(1 - \frac{v \cos \theta}{c}\right) = f_{\text{lab}} \left(1 - \frac{d \cos \theta}{ct_{\text{arrival}}}\right),$$

where f_{obs} is the laser frequency observed by the atom, f_{lab} the laser frequency in the lab frame, $v = d/t_{\text{arrival}}$ the velocity of the atoms, d the distance from the target to observation point, θ is an angle between PI laser and the atomic plume and c is the speed of the light in vacuum. The bright line at 145 μs is the flash of the ablation laser. By converting wait time to the velocities and rescaling PMT counts by multiplying their corresponding atom velocities due to the fact that the transition $^1S_0 \rightarrow ^1P_1$ is a closed transition we can obtain the frequency-independent velocity distribution of the ablated atoms. So we sum all PMT counts and fit the final result with a Maxwell-Boltzmann speed distribution:

$$N \cdot f_{\text{MB}}(v, T) = N \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} 4\pi v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}},$$

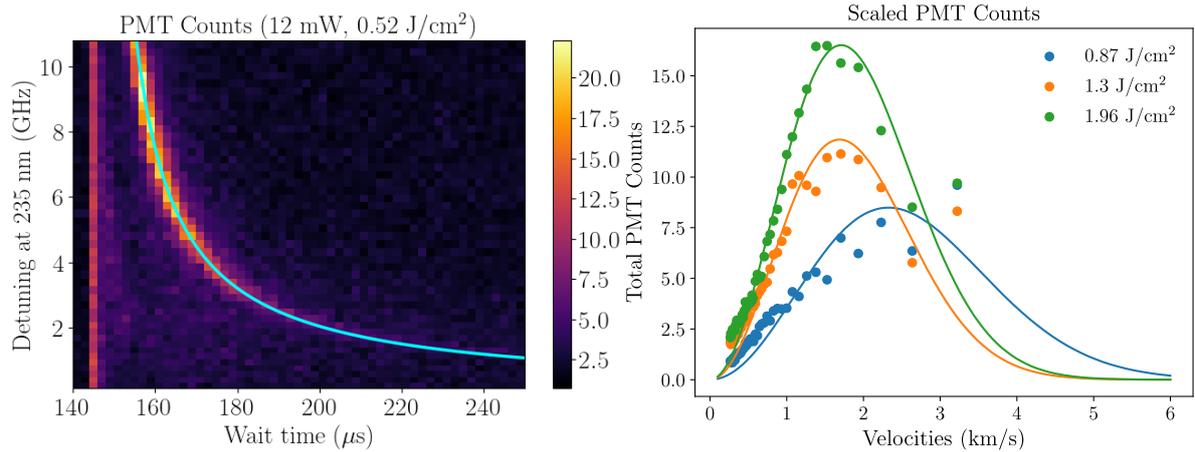


Fig. 1: left – PMT counts dependent on PI detuning and waiting time. The color bar shows the number of counts and the blue line is the overlaid theoretical curve given by Doppler shift equation, right – velocities distribution

where N is a scaling factor, T is a temperature in Kelvin, m is the beryllium atomic mass and k is the Boltzmann constant. The main reason for finding the lowest possible power of the ablation laser is that we expect to be more likely to trap and cool ions with velocities below 100 m/s in the real setup. So as we can see in Fig. 1 we can produce significant part of such rather slow atoms. In our experiment we found the ablation threshold near 0.87 J/cm² which has the same order of magnitude with the results for other metals (Ni, In, Cu, Mo, Au) shown in [2].

Literature

1. Cook, E. et al. Testing Quantum Electrodynamics in the Lowest Singlet State of Neutral Beryllium-9 // Physical Review Letters 121 (2018)
2. Shirk M.D. and Molian P. A. A review of ultrashort pulsed laser ablation of materials // Journal of Laser Applications 10.18 (1998)

Секция физики твердого тела

УДК 537.622

Влияние механических напряжений на морфологию и магнитную доменную структуру поверхности соединений $Tb_{0,16}Ho_{0,84}Fe_{2-x}Co_x$

А.С. Стречень, Ю.А. Курносков, Г.Г. Дунаева, А.Ю. Карпенков, Е.М. Семенова

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Магнитострикционные интерметаллиды RFe_2 (R – редкоземельный элемент) активно применяются в современных преобразователях и сенсорах [1]. Соединения этого типа характеризуются структурой фаз Лавеса: кубической ($C15$) или гексагональной ($C14$). Варьирование параметров структуры, констант магнитокристаллической анизотропии и основных магнитных характеристик может осуществляться легированием бинарных составов 3d- и 4f-переходными элементами, при этом квазибинарные составы демонстрируют экстремальные магнитострикционные и магнитокалорические свойства [2, 3].

Объектом исследования в данной работе являются интерметаллиды $Tb_{0,16}Ho_{0,84}Fe_{2-x}Co_x$ ($x = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4$). Исходные сплавы были получены методом индукционной плавки в атмосфере аргона, после чего были подвергнуты гомогенизирующему отжигу. Замещение части железа кобальтом влияет как на параметры кристаллической структуры, так и на константу магнитострикции: с ростом x параметр a решетки уменьшается, а I_{111} увеличивается [3].

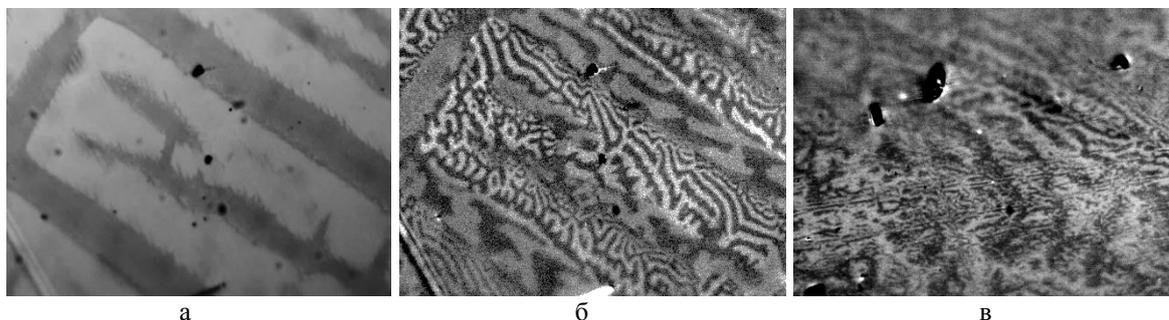


Рис. 1. Изображения поверхности образца $Tb_{0,16}Ho_{0,84}Fe_{1,7}Co_{0,3}$, полученные методом оптической микроскопии

При подготовке поверхности интерметаллидов для исследования доменной структуры (ДС) применялась механическая полировка на алмазных пастах. Было обнаружено, что вследствие такой обработки на поверхности шлифов формируется регулярная объемная микроструктура (рис. 1а), которая со временем релаксирует и полностью исчезает. Анализ такой поверхности методом РЭМ выявил аналогичный топографический контраст, при этом локальный элементный состав участков поверхности совпадает с интегральным и соответствует стехиометрии исследуемого соединения. Магнитная доменная структура выявлялась методом полярного эффекта Керра. На рис. 1б представлена ДС, соответствующая участку поверхности после полировки. Ширина доменов и доменный контраст, соответствующие светлым и темным участкам микроструктуры поверхности (рис. 1а), различаются, что указывает на отличие составляющих намагниченности, перпендикулярных поверхности наблюдения. После релаксации объемная микроструктура не выявляется, а керровский контраст показывает неупорядоченную структуру тонких доменов (рис. 1в). Причиной подобного поведения поверхности являются стрикционные напряжения, возникающие в процессе механической полировки.

Исследования выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2020-0007) на оборудовании ЦКП ТвГУ.

Литература

1. *Olabi A.G., Grunwald A.* Design and application of magnetostrictive materials // *Materials and Design.* 2008. V. 29. P. 469–483.
2. *Tereshina I.S., et al.* Magnetocaloric effect in $(\text{Tb,Dy,R})(\text{Co,Fe})_2$ ($\text{R}=\text{Ho}, \text{Er}$) multicomponent compounds // *Journal of Physics: Conference Series.* 2011. V. 266. 012077.
3. *Хоменко М.Р.* [и др]. Гигантская магнитострикция многокомпонентных интерметаллидов на основе RFe_2 // Международная конференция «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала. Сборник трудов. 2021. С. 217.

УДК 53.043

Возбуждение плазмонных осцилляций в системе 2ДЭГ и оценка параметров 2Д-электронной плазмы по данным спектров эмиссии ТГц-излучения

Е.Р. Бурмистров, Л.П. Авакяни

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет

Предложен новый подход к определению параметров двумерного электронного газа (2ДЭГ) в квантовых ямах InGaN/GaN . Метод основан на регистрации частот 2Д плазмонных резонансов, возбуждаемых в 2ДЭГ в рамках терагерцовой спектроскопии с временным разрешением (THz-TDS) [1].

Объектом исследования является типичная для светодиодных гетероструктур $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaIn}/\text{GaIn}$ с квантовыми ямами InGaN/GaIn в $p-n$ -переходе GaIn -слоевая структура. Для исследуемых образцов первыми напылялись низкотемпературный и буферный слои нелегированного $i\text{-GaIn}$ с толщинами 20 и 0.7 нм, выращенные на сапфировой подложке (толщина 10 мкм) в направлении $[0001]$. Далее следует слой $n\text{-GaIn}$, легированный кремнием с концентрацией доноров $N_D = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ толщиной 3.6 мкм. Буфером служила сглаживающая сверхрешетка $\text{InGaIn}/\text{GaIn}$. Активная область состояла из 5 квантовых ям/квантовых барьеров (КЯ/КБ) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaIn}$ толщинами 3/12 нм с концентрацией индия 0.24. Формировались слои $p\text{-AlGaIn}$ (толщина 20 нм), легированные магнием, с концентрацией акцепторов $N_A = 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и $p\text{-GaIn}$ (толщина 120 нм). Рассчитывалась ширина запрещенной зоны тройного соединения $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaIn}$ с помощью эмпирического выражения: $E_g = 0.675x + 3.44(1-x) - 1.3(1-x)x$. Подстановка концентрации индия $x = 0.24$ приводит соответственно к ширине запрещенной зоны сплава $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaIn}$: $E_g = 2.5$ эВ.

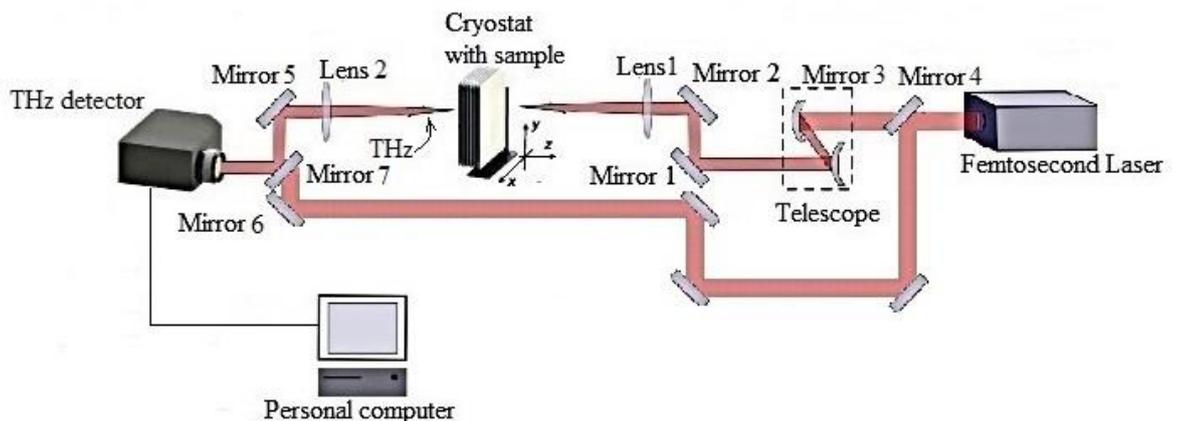


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для регистрации ТГц плазмонных резонансов в образцах гетероструктур $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$

Спектры излучения ТГц-излучения были записаны в геометрии пропускания (рис. 1). Излучение ТГц-лазера с длительностью импульса 135 фс и длиной волны 797 нм разделяется на два луча. Первый из них направлен на генерацию плазмонных осцилляций в системе 2ДЭГ. Второй проходит через оптическую систему задержки и используется для управления ТГц-детектором, чувствительным к электрическому полю ТГц-импульсов. Временное стробирование ТГц-детектора, регистрирующего ТГц-излучение, осуществлялось путем изменения расстояния между зеркалами 6 и 7. Система, состоящая из активного (InGaIn) слоя, барьерного (GaIn) слоя и локализованного между ними

2ДЭГ, образует терагерцовый плазмонный резонатор. При взаимодействии фемтосекундного лазерного пучка с 2ДЭГ наблюдалась генерация ТГц-излучения с характерными резонансными частотами 2.37 ТГц, 3.48 ТГц.

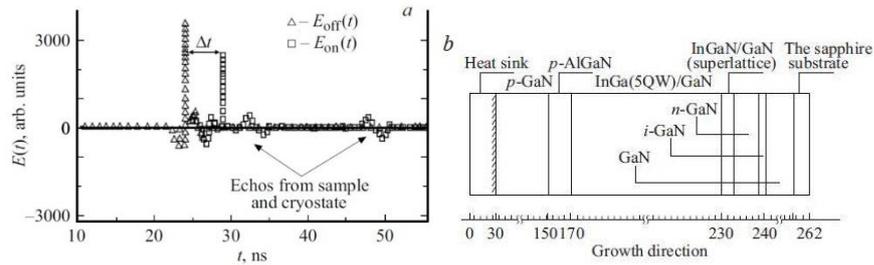


Рис. 2. Полученные зависимости: (а) – осциллограмма электрического поля ТГц-импульсов во временной области при температуре 90К; (б) – слоевая структура образца InGaN/AlGaIn/GaN

На рис. 2 представлен пример записанных сигналов $E_{off}(t)$ (передается через пустой криостат) и $E_{on}(t)$ (опорный сигнал, переданный через криостат с образцом) во временной области. Видно, что пик сигнала $E_{on}(t)$ сдвинут на величину Δt относительно пика $E_{off}(t)$. Задержка импульса является результатом конечного времени перестройки системы 2ДЭГ в КЯ InGaIn/GaN и представляет собой время релаксации импульса 2ДЭГ в КЯ InGaIn/GaN. Для характеристики спектров ТГц-излучения были определены такие параметры, как спектральная мощность $P_i(f) = |E_{on}(f)|^2 / |E_{off}(f)|^2$ и фазовый сдвиг $\Phi_i(f) = \phi_{on}(f) - \phi_{off}(f)$. На рис. 3. представлены модулированные полосами Фабри–Перо осцилляции функций $P_{1,2}(f)$ и $\Phi_{1,2}(f)$ вследствие отражения лазерного импульса от подложки и его многократной интерференции в слоях гетероструктуры.

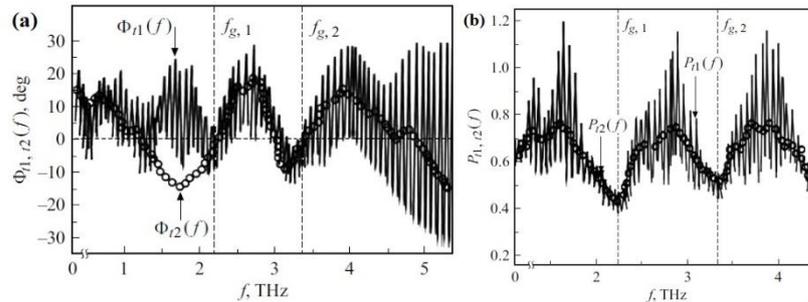


Рис. 3. Частотные зависимости фазы (а) и мощности (б) ТГц-сигнала

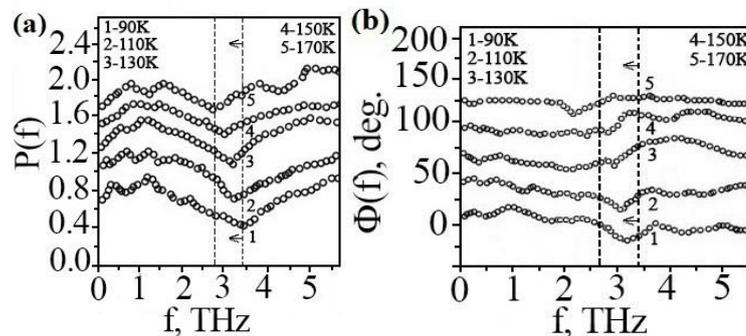


Рис. 4 Частотная зависимость мощности (а) и фазы (б) ТГц-излучения для образца.

Стрелки указывают на красное смещение 2Д плазмонного резонанса

Для рассматриваемых плазмонных структур резонансные частоты оценивались из закона дисперсии стробруемых 2Д плазмонов: $f_{g,n} = (1/2\pi)\sqrt{(4\pi e^2 N_{2DEG} |q_n|) / (m^* \epsilon_0 (\epsilon_s + \epsilon_d \coth(|q_n| d_{2DEG})))}$, где $q_n = 2\pi n / P$, $n = 1, 2, \dots$ (для InGaIn/AlGaIn/GaN $n = 2$, период активного слоя $P = 15$ нм); ϵ_s – диэлектрическая постоянная; $\epsilon_d = 8.2 + i\gamma$ – диэлектрическая проницаемость, для которой введен параметр $\gamma = 1.8$; m^* – эффективная масса, определяемая из закона дисперсии; $d_{2DEG} = 28$ нм – глубина залегания 2ДЭГ

с концентрацией $N_{2DEG} \sim 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Построены частотные зависимости мощности и фазового сдвига ТГц-излучения в диапазоне температур от 90 до 170 К с шагом 30 К (рис. 4). Пунктирные вертикальные линии обозначают положение частот плазменных резонансов. Стрелки указывают красное смещение резонансной частоты с увеличением температуры образца. В ходе исследований был обнаружен эффект перенормировки эффективной массы и модуляции фазы вблизи частот 2Д плазменных резонансов.

Литература

1. Zhang X.-C., Jingzhou Xu, Introduction to THz Wave Photonics. 2010, 248 p.

УДК 538.915

Применение DMFT для исследования роли магнитных корреляций в двумерной модели Хаббарда

И.А. Горемыки, А.А. Катанин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Для моделирования свойств высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) в нормальной фазе (в частности, явления псевдощели) был рассмотрен переход электронной системы, описываемой двумерной моделью Хаббарда в режиме сильных электронных корреляций, из парамагнитного в антиферромагнитное состояние. Также было исследовано поведение поверхности Ферми при этом переходе. При этом ближний магнитный порядок ВТСП соединений моделируется дальним магнитным порядком. Численный расчёт состояния системы проводился с использованием динамической теории среднего поля (DMFT) [1]. Гамильтониан двумерной модели Хаббарда имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_{(i,j),\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (1)$$

Для электронов на квадратной решётке в законе дисперсии был учтён перескок между ближайшими и следующими после ближайших соседями с амплитудами перескока t и t' соответственно:

$$\varepsilon(k) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y \quad (2)$$

В антиферромагнитном состоянии функции Грина для спинов разных ориентаций становятся не равными друг другу, поэтому уравнения на них переписываются в матричной форме. При этом основная решётка разбивается на две подрешётки, обозначаемые ниже А и В, которые связаны друг с другом соотношениями:

$$G_{A,\sigma} = G_{B,-\sigma}; \quad \Sigma_{A,\sigma} = \Sigma_{B,-\sigma} \quad (3)$$

Здесь G – локальная функция Грина, Σ – собственная энергия, соответствующая примесной модели. Выражение для решёточной функции Грина одной из подрешёток записывается в виде

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, i\nu_n) = \left[\begin{array}{cc} i\nu_n + \mu - \Sigma_{\uparrow}(i\nu_n) - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} & \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} \\ \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} & i\nu_n + \mu - \Sigma_{\downarrow}(i\nu_n) - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} \end{array} \right]_{\sigma\sigma'}^{-1} \quad (4)$$

Здесь ν_n – мацубаровские частоты, μ – химический потенциал, вектор $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Уравнение самосогласования, связывающее локальную и решёточную функции Грина, принимает вид

$$G_{\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} G_{\sigma\sigma}(\mathbf{k}, i\nu_n) \quad (5)$$

Для расчёта используется обычный DMFT алгоритм:

- Задаёмся начальным приближением для $\Sigma_{\sigma}(iv_n)$.
- Используя уравнения (4) и (5), рассчитываем локальную функцию Грина (свободный пропагатор примесной модели).
- Из примесной модели находим собственную энергию $\Sigma_{\sigma}(iv_n)$.
- Если сходимость не достигнута, возвращаемся к п. 2 алгоритма.

В качестве примесной модели использовалась примесная модель Андерсона с гамильтонианом

$$\hat{H}_{AM} = \sum_{l\sigma} \epsilon_l \hat{a}_{l\sigma}^+ \hat{a}_{l\sigma} + \sum_{l\sigma} V_l (\hat{a}_{l\sigma}^+ \hat{c}_{0\sigma} + \hat{c}_{0\sigma}^+ \hat{a}_{l\sigma}) + U \hat{n}_{0\uparrow} \hat{n}_{0\downarrow} - \mu \hat{c}_{0\sigma}^+ \hat{c}_{0\sigma} \quad (6)$$

Для нахождения соответствующей ей собственной энергии $\Sigma_{\sigma}(iv_n)$ использовался пакет СТНУВ, основанный на инструментарии, предоставляемом пакетом TRIQS [2].

Для численного расчёта использовался следующий набор параметров: $t = 1.0$, $t' = 0.15$, $U = 7.5$, температура $T = 0.1$. Исследовались зависимости химического потенциала μ и намагниченности $S_z = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) / 2$ от заполнения $n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$, они приведены на рис. 1. Также исследовалось поведение поверхностей Ферми от n (или же μ , что эквивалентно в силу монотонной зависимости $n(\mu)$). Поверхности Ферми находились из уравнения

$$\text{Re}(G_{\sigma\sigma}^1(k, 0)^{-1}) = 0 \quad (7)$$

Несколько характерных Ферми поверхностей приведены на рис. 2. Для n , больших $n = 0.95$, векторов k , удовлетворяющих уравнению (7), не существует. При чуть меньших n поверхности Ферми имеют вид дырочных карманов вблизи точек $(\pi/2, \pi/2)$, которые увеличиваются с уменьшением заполнения. При критическом заполнении $n \leq 0.75$ они сменяются большой (электронной) поверхностью Ферми.

Таким образом, был смоделирован переход от передопированного к недоопированному состоянию ВТСП соединений с ростом числа электронов в системе, а также получены наблюдаемые физические величины: поверхности Ферми и зависимости $n(\mu)$ и $S_z(n)$.

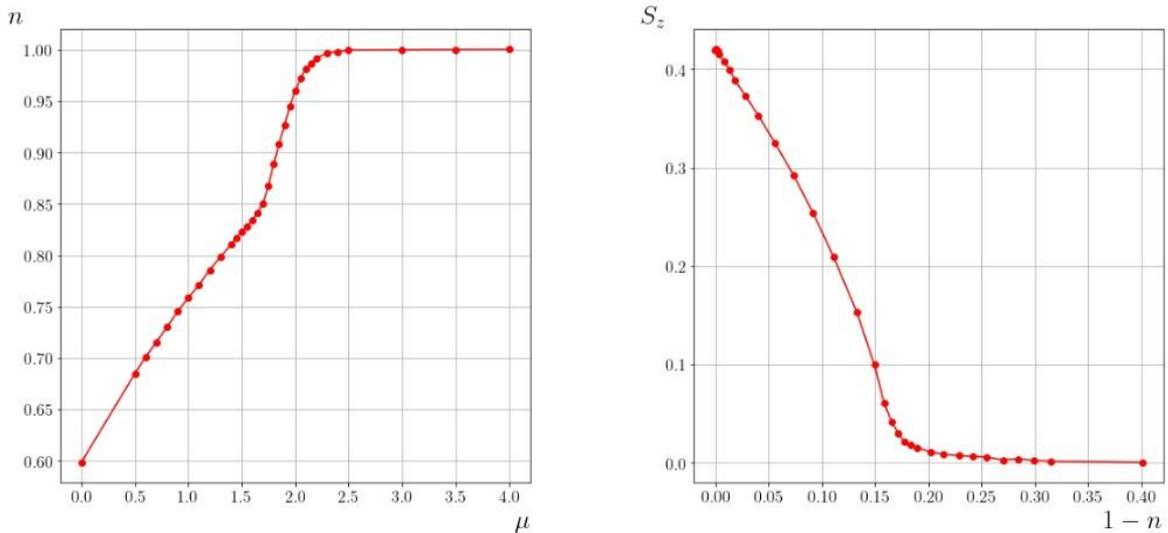


Рис. 1. Зависимости числа заполнения n от хим. потенциала μ и намагниченности S_z от $1 - n$

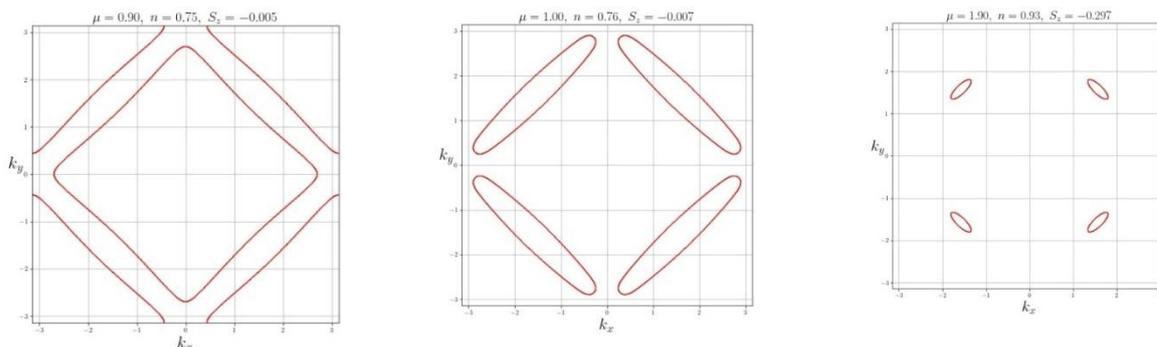


Рис. 2. Поверхности Ферми для некоторых значений числа заполнения n

Литература

1. *Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M.J.* Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions // *Rev. Mod. Phys.* 68(1), 13–125 (1996).
2. *Parcollet O., Ferrero M., Ayrat T., Hafermann H., Krivenko I., Messio L., Seth P.* TRIQS: A toolbox for research on interacting quantum systems // *ComP. Phys. Comm.* 196, 398–415 (2015).

УДК 53.05

Повышение эффективности фотоэлемента путем пассивации поверхности кремниевых пластин прозрачным проводящим покрытием на основе оксида олова

Д.О. Мурзалинов

Физико-технический институт (КазНИТУ им. К.И. Сатпаева)

Текстурирование кремниевых пластин – эффективный способ уменьшения внутреннего отражения света. Пассивация их поверхности путем нанесения тонких пленок снижает вероятность рекомбинации заряда на оборванных связях. Прозрачное проводящее покрытие на основе SnO₂, полученное золь-гель методом, благодаря мягким условиям растворной химии, обеспечивает образование пленки без появления других оксидов олова [1, 2].

Целью данной работы являлось определение режимов нанесения покрытия оксида олова на текстурированную поверхность кремниевых пластин, для снижения поверхностного сопротивления и увеличения поглощения образцом.

Исходные пластины имели различную поверхностную дефектность, что связано с разным временем обработки в кислотах в процессе текстуризации и травления. А-56 – не текстурированный кремний, Т-46 – образец с не равномерным распределением пирамидок, Т-30 – образец с равномерным распределением пирамидок по поверхности.

Покрывая 5 слоями SnO₂, оборванные связи образца А-56 кремния вступают в реакцию с частицами пленкообразующей системы и теряют свою активность (рис. 1). При этом поверхностное сопротивление падает. Дальнейшее увеличение количества слоев также уменьшает количество оборванных связей и сопротивление.

Для Т-46 покрытие 5 слоями SnO₂ приводит к повышению сопротивления вследствие увеличения дефектности. Нанесение 10 слоями приводит к снижению сопротивления. При нанесении 15 слоев происходит полная пассивация поверхности пластин и далее при 20 слоях сопротивление изменяется незначительно. Аналогичная картина происходит для образца Т-30. 15 слоев оксида олова достаточно для полной пассивации поверхности кремниевых пластин.

Сравнивая графики, заметно, что при покрытии 5 слоями наибольший рост сопротивления происходит для Т-30. Это связано с тем, что для данных пластин при травлении и текстуризации время обработки в кислотах самое высокое. Поэтому более эффективно удаляется нарушенный слой, образованный при их резке кремния на пластины.

Не менее важным является зависимость оптических параметров от числа нанесенных пленок покрытия. Из спектров рис. 3 видно, что при увеличении количества слоев от 5–15 для образца Т-30 коэффициент поглощения растёт, тогда как отражение уменьшается, а пропускание света остается практически неизменным. При этом возрастает вероятность образования электронно-дырочных пар.

Заметно, что при нанесении 15 слоев происходит максимальный рост коэффициента поглощения, затем происходит уменьшение данного параметра. Подобная тенденция заметна при измерении удельного сопротивления. Дальнейшее увеличение количества наносимых слоев (больше 20) увеличит поглощение света.

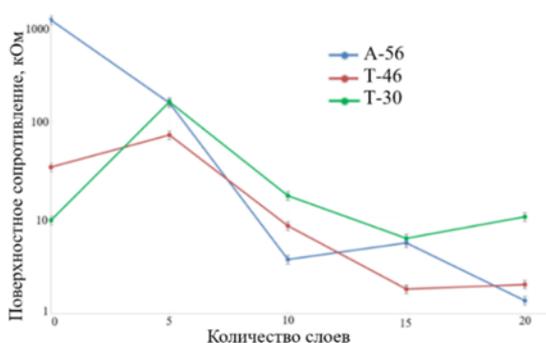


Рис. 1. Зависимость удельного сопротивления от количества наносимых слоев покрытия

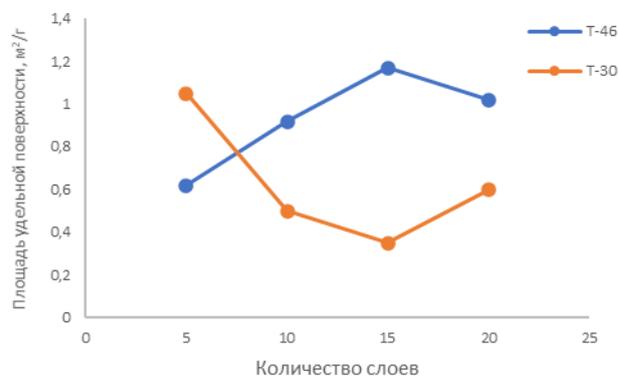


Рис. 2. Зависимость площади удельной поверхности образцов от количества наносимых слоев покрытия

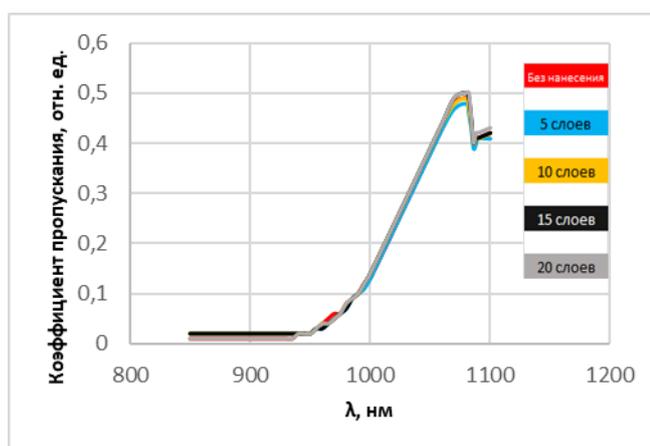
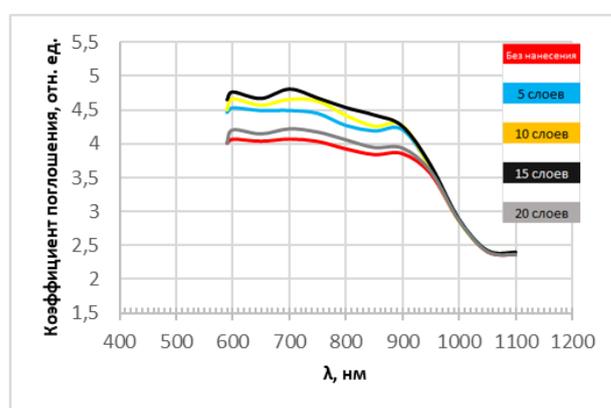
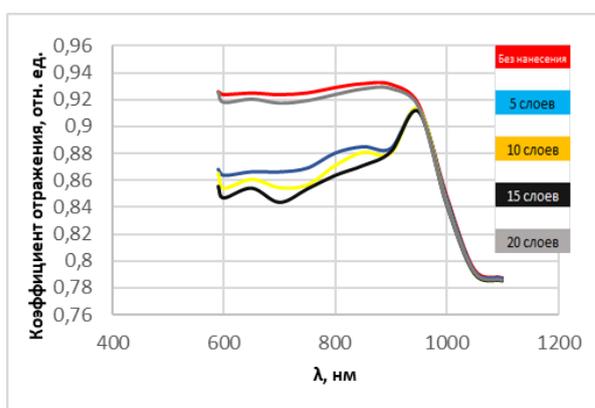


Рис. 3. Оптические характеристики в зависимости от количества наносимых слоев покрытия (образец T-30)

Изменение площади удельной поверхности образца влияет на поглощение света. Анализ методами адсорбции и десорбции позволяет оценить данный параметр. Покрытие 5 и 10 слоев осаждается на поверхность пластины в виде отдельных шарообразных и нитевидных образований. Тем самым уже развитая текстурированием поверхность увеличивает свою неоднородность. Известно, что такая поверхность поглощает больше света, чем ровная. Усложняя морфологию текстурированной поверхности частицами покрытия, мы уменьшаем отражение света. Причиной увеличения поглощения света образцом T-30 при нанесении от 5 до 15 слоев покрытия является повышение площади удельной поверхности (рис. 2). Дальнейшее снижение коэффициента поглощения связано с уменьшением площади поверхности.

Таким образом, нанесение 15 слоев является критической точкой при измерении оптических параметров, площади удельной поверхности, а также удельного сопротивления для исследуемых образцов.

Литература

1. *Matthias Batzill, Ulrike Diebold* 2005 The surface and materials science of tin oxide // *Progress in Surface Science*. 2005.V. 79. P. 49–53.
2. *Mukhamedshina D.M., Mit' K.A., Beisenkhanov N.B., Dmitriyeva E.A., Valitova I.V.* Influence of plasma treatments on the microstructure and electrophysical properties of SnO_x thin films synthesized by magnetron sputtering and sol-gel technique // *Journal of Materials Science-Materials in Electronics*. 2008. V. 19. P. S382–S387.

УДК 538.9

Исследования электрофизических свойств перфторсульфоновых мембран, модифицированных катионами тербия

Т.В. Резцов, Н.А. Лапатин

РГПУ им. А.И. Герцена

В настоящее время огромный интерес представляют собой полимерные перфторсульфоновые мембраны в связи с тем, что они обладают довольно полезными свойствами, благодаря которым мембраны могут успешно применяться на практике, например, в топливных элементах в качестве твердого электролита, в датчиках влажности в качестве чувствительных элементов, а также входят в состав сенсорных устройств. Наиболее популярными представителями таких мембран можно считать фторированные полимерные протонпроводящие мембраны, такие как: «Nafion» (США), «Flemion» (Япония), «Aciplex-S» (Япония), «Dowmembrane» (США) и «МФ-4СК» (Россия) [1, 2]. Особенностью данных мембран является хорошая механическая устойчивость и химическая инертность, обусловленная структурой мембран и гибкостью фторуглеродного каркаса. Но при этом имеется недостаток, связанный с падением протонной проводимости, в условиях понижения относительной влажности и повышения температуры эксплуатации. Более того, по мере повышения температуры сверх 90 градусов Цельсия происходят изменения пористости мембран, уменьшение порового объема и разрушение исходной структуры [1, 3, 4].

В связи с выше сказанным для сохранения и даже улучшения проводимости в условиях эксплуатации имеет место модификация мембран, позволяющая повысить эффективность их применения [4,5,6]. Модификация мембран позволяет улучшать такие характеристики, как проводимость, влагопоглощение и их эксплуатационную устойчивость при более высоких температурах, а также влиять на проявление необычных спектрально-люминесцентных свойств полученных композитов и т.д. [2, 7, 8].

В качестве исследуемого образца для данной работы были взяты перфторированные ионообменные мембраны МФ-4СК (НПО ОАО «Пластполимер», Санкт-Петербург).

Во время первого этапа исследования были проведены подготовка мембраны путем кипячения в концентрированной азотной кислоте в течение 2 часов, позволяющая очистить мембраны от возможных примесей и дальнейшая модификация мембраны путем выдерживания мембраны в водном растворе солей редкоземельных элементов. Контроль сорбции производили спектрофотометрически на приборе «UVmini-1240» производства компании «Shimadzu». Количественное определение сортированной соли проводили по убыли концентрации прекурсора. Вместе с тем для структурной идентификации исходных мембран и их изменения при модификации тербием (влияния на закономерности процессов переноса заряда) были получены спектры МНПВО, снятые с помощью фурье-спектрометра «ФСМ 1202», включающего в себя приставку «МНПВО36». На полученных спектрах были видны полосы поглощения характеристических колебаний образцов, а также наблюдалось ослабление полос поглощения, связанных с содержанием воды в образцах модифицированных тербием.

Измерения диэлектрических спектров (температурно-частотных зависимостей диэлектрических параметров) проводились на спектрометре «Concert-81». Была получена частотная зависимость удельной проводимости для модифицированных солью тербия (III) мембран, которая показала, что в исследуемой области частот данная зависимость подчиняется степенному закону. Вдобавок, была получена температурная зависимость удельной проводимости, на которой были выявлены две области температур. В области меньших температур наблюдалось уменьшение проводимости образца при его модифицировании тербием (III), в области более высоких температур ее повышение.

Таким образом, в данной работе был реализован метод модификации перфторсульфоновых мембран МФ-4СК и получены данные, на основе которых планируется изучение частотных и температурных зависимостей диэлектрических параметров (диэлектрической проницаемости, удельной проводимости и др.) полученных композитных материалов и их изменение при модификации, а также предполагается анализ полученных результатов в рамках общепринятых моделей диэлектрической релаксации и переноса заряда в полимерных системах и композитах на их основе, расчет параметров систем (энергии активации релаксационных процессов, длины прыжков и др.) и влияние модифицирования пленок на значение этих параметров.

Литература

1. *Лебедева О.В.* Протонпроводящие мембраны для водородно-воздушных топливных элементов // Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология. 2016. № 1. С.7–19.
2. *Иванчёв С.С., С.В. Мякин С.В.* Полимерные мембраны для топливных элементов: получение, структура, модифицирование, свойства // Успехи химии. 2010. № 79. С.117–134.
3. *Цивадзе А.Ю., Тарасевич М.Р., Андреев В.Н., Богдановская В.А.* Перспективы создания низкотемпературных топливных элементов, не содержащих платину // Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И.Менделеева. 2006. № 6. 109–114 с.
4. *Добровольский Ю.А., Волков Е.В., Писарева А.В., Федотов Ю.А., Лихачев Д.Ю., Русанов А.Л.* Протонообменные мембраны для водородно-воздушных топливных элементов // Российский химический журнал. 2006. 95–103 с.
5. *Лапатин Н.А., Пак В.Н.* Особенности сорбции и люминесценции катионов Tb³⁺ и азометиновых оснований в перфторсульфоновой мембране // Т. 89. Журнал общей химии. 2019. № 9. 1826–1829 с.
6. *Лапатин Н.А., Пак В.Н.* Сорбция и спектрально-люминесцентные свойства азометиновых оснований в перфторсульфоновой мембране // Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета). 2020. № 52. 45–49 с.
7. *Лапатин Н.А., Борисов А.Н., Пак В.Н.* Флуоресценция N,N'-бис(салицилимиден)-1,3-пропилендиамин и его галогенпроизводных в перфторсульфоновой мембране // Т. 126. Оптика и спектроскопия. 2019. № 5. 544–546 с.
8. *Antonucci P. L., Arico A.S., Creti P., E. Ramunni E., Antonucci V.* Investigation of a direct methanol fuel cell based on a composite Nafion silica electrolyte for high temperature operation.

УДК 535.015

Контроль суммарного знака резидентных зарядов в квантовой яме GaAs/AlGaAs

А.А. Бутюгина, Р.С. Назаров, И.А. Соловьёв, Ю.В. Капитонов

Санкт-Петербургский государственный университет

Для реализации хранения и управления оптической информацией возможно использование спиновых состояний в полупроводниковых материалах. Преимущество таких методов заключается в том, что они позволяют осуществлять быструю запись с помощью коротких лазерных импульсов на субпикосекундных временах. Также спины резидентных носителей способны хранить когерентное состояние, то есть помнить информацию, в течение значительного времени, достигающего в квантовых точках микросекунд. С помощью фотонного эха на заряженных экситонных комплексах (трионах) можно создать долгоживущую оптическую память. В связи с этим необходимо регулировать знак зарядов в квантовой яме, например, с использованием надбарьерной оптической накачки [1].

В данной работе было проведено исследование фотолюминесценции (PL) квантовой ямы GaAs / AlGaAs при надбарьерной оптической накачке ($E=2.33$ эВ). В работе [2] с помощью наблюдения за осцилляциями спина существующих в образце частиц в магнитном поле было установлено, что энергия отрицательных трионов немного больше, чем энергия положительных трионов. Без накачки в квантовой яме присутствовали резидентные дырки, поэтому в спектрах фотолюминесценции наблюдались особенности, связанные с положительными трионами. С ростом интенсивности накачки уменьшается сигнал от положительных трионов (T⁺) и появляется сигнал от экситонов (X), после чего наблюдается сигнал от отрицательных трионов (T⁻) (рис. 1а). Таким образом, с помощью надбарьерной подсветки можно контролировать знак и концентрацию трионов в квантовой яме (рис. 1б).

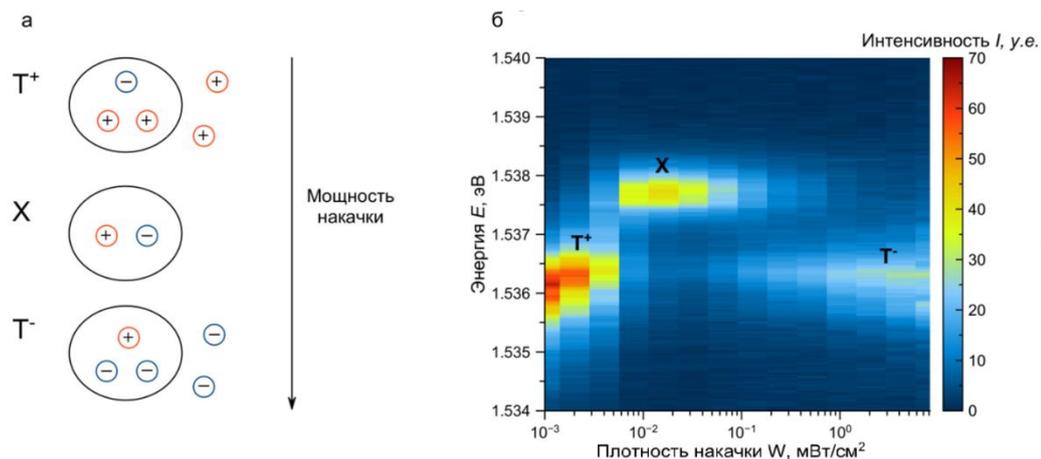


Рис. 1. Процесс накачки (а), зависимость спектров PL от плотности мощности накачки (б)

Благодарности

Работа выполнена на оборудовании Ресурсного центра СПбГУ «Нанопотоника» при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 19-52-12046 ппио_а).

Литература

1. Solovov I.A., Kapitonov Yu.V., Davydov V. G., Efimov Yu.P., Eliseev S.A., Petrov V. V., Ovsyankin V. V. Bleaching compensation in GaAs/AlGaAs quantum wells by above-barrier illumination // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V. 8. P. 929
2. Syperek M., Yakovlev D.R., Greulich A., Misiewicz J., Bayer M., Reuter D., Wieck A.D. Spin coherence of holes in GaAs/(Al, Ga)As quantum wells // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 1. P. 99.

УДК 535.015

Увеличение времени необратимой фазовой релаксации экситонного ансамбля при воздействии непрерывным лазерным излучением в квантовой яме GaAs/AlGaAs

Р.С. Назаров, И.А. Соловьёв, Ю.В. Капитонов

Санкт-Петербургский государственный университет

Один из возможных способов реализации квантовых логических элементов – обработка информации с помощью световых сигналов. Фотонное эхо является явлением, которое может быть использовано в основе квантового логического элемента [1].

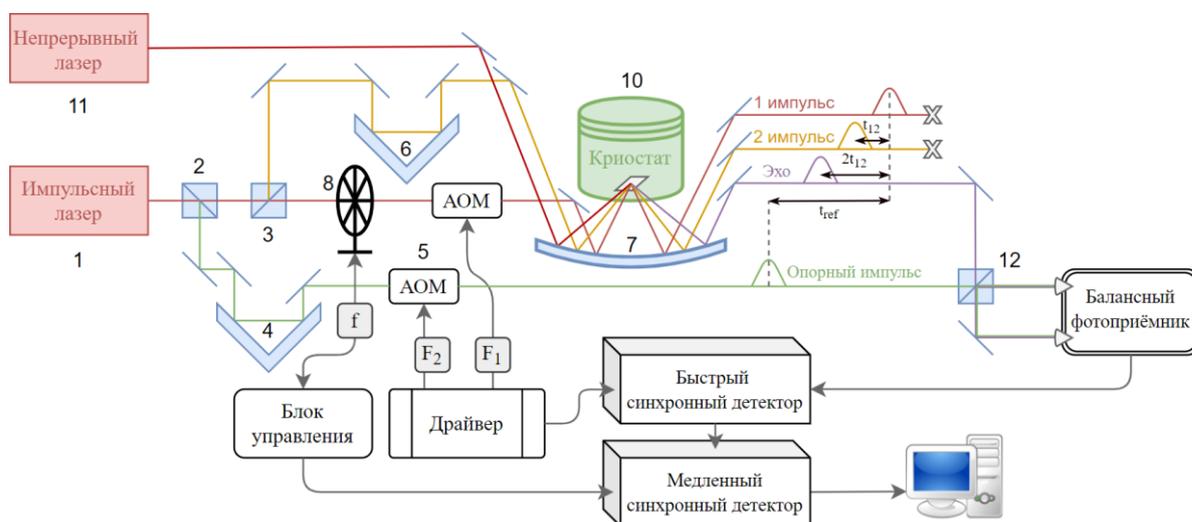


Рис. 1. Оптическая схема установки

В настоящей работе изучается характер когерентной динамики методом четырехволнового смешения и фотонного эха от экситонов в квантовой яме AlGaAs / GaAs при оптической накачке непрерывным лазерным излучением. Строится теоретическая модель и проводится компьютерное моделирование для определения спектрального положения экситонного резонанса.

Схема эксперимента показана на рис. 1, параметры квантовой ямы – рис. 2. В ходе эксперимента температура образца составила $T = 1.45$ К. Полученные экспериментальные данные позволяют говорить о наличии фотонного эха в образце (рис. 3). Различные спектральные положения сигнала фотонного эха были соотнесены с ансамблями экситонов и их комплексов. В ходе эксперимента удалось увеличить время необратимой фазовой релаксации экситонного ансамбля с помощью накачки непрерывным лазерным излучением (рис. 4, 5).

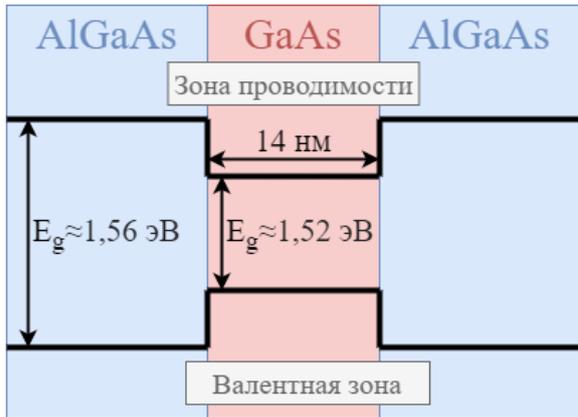


Рис. 2. Энергетическая схема образца

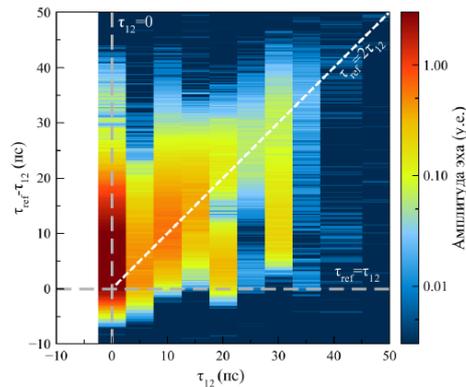


Рис. 3. Зависимость временной огибающей амплитуды фотонного эха от задержки между 1 и 2 импульсом. Пунктирная линия $\tau_{ref} = 2\tau_{12}$ соответствует положению эха, $\tau_{ref} = \tau_{12}$ - второго возбуждающего импульса

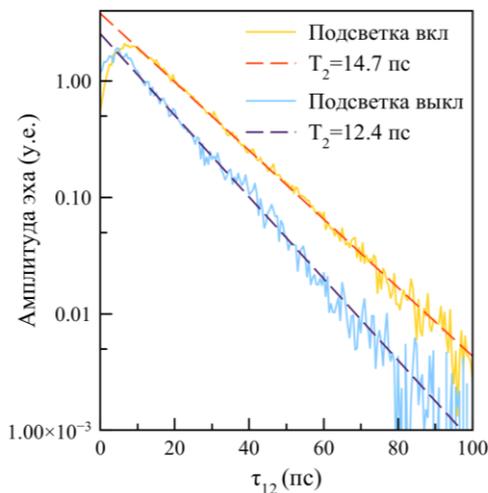


Рис. 4. Затухание фотонного эха с подсветкой непрерывным излучением и без неё. Пунктиром изображена аппроксимация экспонентой вида $\exp\left(-\frac{2\tau_{12}}{T_2}\right)$

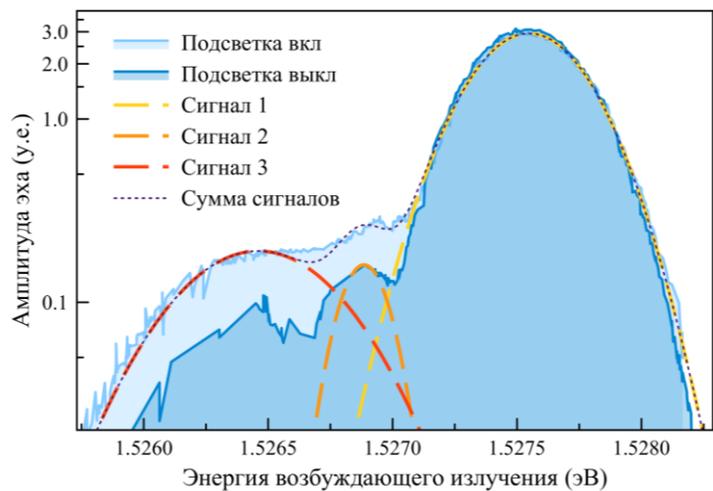


Рис. 5. Спектры фотонного эха без подсветки и с непрерывной подсветкой с $E = 1.558$ эВ. Частым пунктиром показана аппроксимация спектра с подсветкой, полученная как сумма трех гауссианов (показаны пунктиром)

Работа выполнена на оборудовании Ресурсного центра СПбГУ «Нанофотоника» при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 19-52-12046 nnio_a).

Литература

1. Langer L., Poltavtsev S.V., Yugova I.A. Access to long-term optical memories using photon echoes retrieved from semiconductor spins // Nature Photonics. 2014. Т. 8.

Магнитные свойства $\text{HoFe}_{3-x}\text{Ga}_x(\text{BO}_3)_4$

В.Р. Кучешева-Титова^{1,2,3}, И.А. Гудим², Е.В. Еремин^{2,3}

¹ФГБНУ КНЦ СО РАН

²Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН

³Сибирский федеральный университет

В современной физике магнитных явлений в последние десятилетия растет интерес к поиску и исследованию новых магнитных материалов. Совсем недавно обнаружено, что $\text{HoGa}_3(\text{BO}_3)_4$ демонстрирует гигантский магнитоэлектрический эффект. Таким образом, редкоземельные галлиевые бораты можно рассматривать как перспективные материалы не только для люминесцентного и лазерного применения, но и для использования в устройствах спинтроники [1].

Для исследований магнитных свойств было выбрано семейство кристаллов: $\text{HoFe}_{3-x}\text{Ga}_x(\text{BO}_3)_4$, которые выращивались из раствора-расплава на основе тримolibдата висмута $(100-n)\%$ масс. $[\text{Bi}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12} + p\text{V}_2\text{O}_3 + q\text{Ho}_2\text{O}_3] + n\%$ масс. $\text{HoFe}_{3-x}\text{Ga}_x(\text{BO}_3)_4$ по методике, подробно описанной в [2].

Выращенные монокристаллы $\text{HoFe}_{2.5}\text{Ga}_{0.5}(\text{BO}_3)_4$ отбирались для измерений с учетом возможности их ориентирования относительно основных кристаллографических осей. Иногда это возможно визуально, если у кристалла присутствует треугольная грань, перпендикулярная оси c . В остальных случаях кристаллы ориентировались с помощью рентгеновского гониометра.

При выборе ориентации подбирали «чистый» кристалл (не должно быть трещин, помутнений и пр.). Для оценки зависимости магнитоэлектрической поляризации от направления магнитного поля относительно кристаллографических осей изготавливали несколько образцов различной ориентации.

Магнитные свойства были исследованы на базе установки PPMS-9 QuantumDesign (центр коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН), позволяющей проводить температурные измерения в диапазоне 4.2–300 К и магнитных полях до 9 Т.

Измерение температурной зависимости намагниченности M_{\parallel} и M_{\perp} производилось в магнитном поле 0.1 Тл, направленном вдоль кристаллографической c -оси и в базисной плоскости вдоль a -оси соответственно.

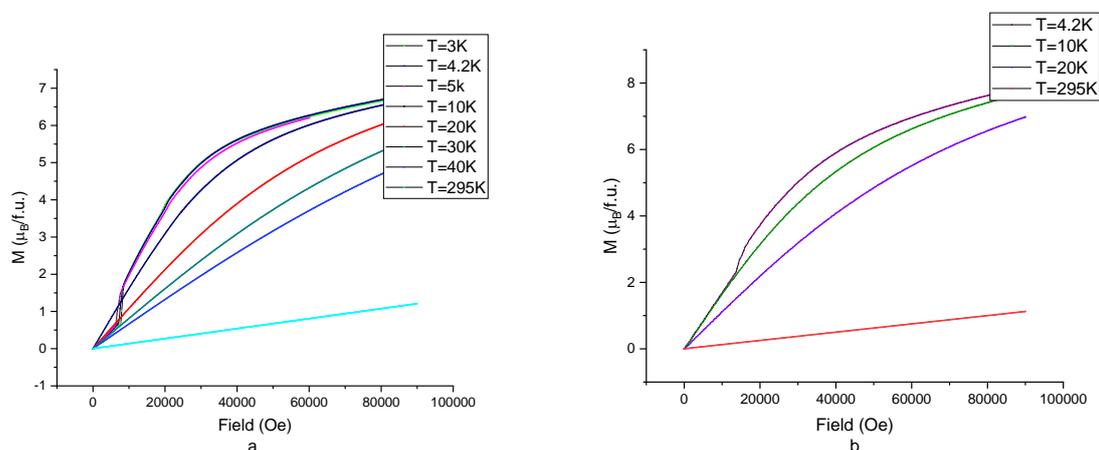


Рис. 1. Полевая зависимость намагниченности выращенного кристалла $\text{HoFe}_{2.5}\text{Ga}_{0.5}(\text{BO}_3)_4$ а) для $M_{\perp c}$, б) для $M_{\parallel c}$

Мы установили, что $\text{HoFe}_{2.5}\text{Ga}_{0.5}(\text{BO}_3)_4$ является антиферромагнетиком.

На рис. 1а представлены полевые зависимости намагниченности выращенного кристалла $\text{HoFe}_{2.5}\text{Ga}_{0.5}(\text{BO}_3)_4$ в направлении $M_{\perp c}$, а на рис. 1б представлены полевые зависимости намагниченности в направлении $M_{\parallel c}$. На кривых намагничивания, вдоль c -оси $\text{HoFe}_{2.5}\text{Ga}_{0.5}(\text{BO}_3)_4$ в статистическом магнитном поле (рис. 1), наблюдались резкие скачки намагниченности, обусловленные ориентацией спинов Fe^{3+} от c -оси в базисную плоскость.

Из рисунка видно, что аномалия температурных зависимостей кривых намагниченностей, измеренных в направлении, перпендикулярном оси c , сдвинута в область более низких полей (с примерно 30000 Э до 20000 Э), по сравнению с незамещенным $\text{HoGa}_3(\text{BO}_3)_4$.

Для исследования магнитных свойств было впервые выращено и измерено семейство кристаллов $\text{HoFe}_{2.5}\text{Ga}_{0.5}(\text{BO}_3)_4$.

Литература

1. *Al'Shinskaya L.I., Leonyuk N.I., Timchenko T.I.* High-Temperature Crystallization, Composition, Structure, and Certain Properties of Rare-Earth Gallium Borates // *Kristall und Technik*. 1979. V. 14, N 8. P. 897–903.
2. *Gudim I.A., Eremin E.V., Temerov V. L.* Flux growth and spin reorientation in trigonal $\text{Nd}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ single crystals // *Journal of Crystal Growth*. 312 (2010) 2427–2430.

УДК 538.9

Исследование протяженных наноструктур, формируемых с помощью электрических и оптических воздействий на конденсированные среды

П.В. Провоторов¹, А.А. Левченко^{1,2}, Н.В. Класен²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН (ИФТТ РАН)

Протяженные наноструктуры – цепочки и сетки из наночастиц, а также нанопроволоки – представляют широкий интерес как для электронной промышленности, биомедицины, атомно-радиационной техники, возобновляемой энергетики [1], так и для комплексного изучения явлений, происходящих и в процессе их формирования, и по его окончании. В данной работе сопоставляются эксперименты по получению таких наноструктур путем лазерных и электрических воздействий на конденсированные среды, приведшие к созданию новых методик формирования цепочек из наночастиц с рекордными длинами до 60 см и с фрактальной морфологией. Показана существенная роль турбулентных вихрей в формировании получаемых структур.

При электрических взрывах молибденовых, оловянных, свинцовых проволочек в кислородсодержащей атмосфере было обнаружено формирование ленто-подобных образований (рис. 1а) с кружевной нано-масштабной морфологией (рис. 1б).

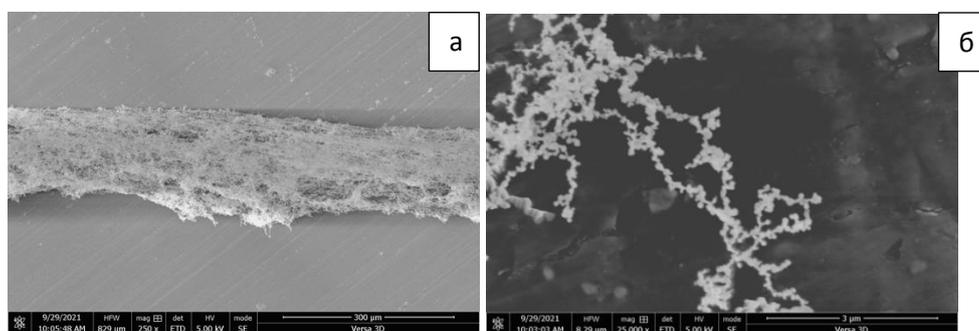


Рис. 1. а, б – структуры SnO_2 , полученные электрическим взрывом оловянной проволоки на воздухе

В морфологии таких лент наблюдаются ряды из наночастиц, ориентированные вдоль их осей, с преобладанием систем замкнутых колец, в которых проявляется фрактальность в виде инвариантности структурных форм колец разных масштабов. Наиболее необычно то, что указанные агломераты имеют макроскопические размеры в виде кружевных лент с длинами до 60 см (MoO_3) или 4 см (PbO , SnO_2) и шириной до 1 мм, которые формируются за доли секунды в сфере радиусом порядка метра от взорванной проволоки.

Особая морфология получаемых структур объясняется образованием турбулентных вихрей в задней части летящей от взрыва горячей капли металла, выброшенной из не полностью испарившейся проволоки в момент протекания по ней импульса тока. Указанные турбулентные вихри способствуют как центробежному сжатию и конденсации образующихся паров [2], так и формированию фрактальной структуры конденсата, что подтверждается компьютерным моделированием.

При лазерном испарении металлов на воздухе с помощью инфракрасного CO_2 лазера были получены конденсаты оксидов меди и свинца с развитой наномасштабной морфологией. По микрофотографиям полученных структур (рис. 2а, б) отчетливо прослеживается тенденция к формированию цепочек из наночастиц. Данное явление возможно объяснить как образованием плотных потоков пара с соответствующими турбулентностями, так и тенденцией к снижению поверхностной энергии за счет агломерации наночастиц.

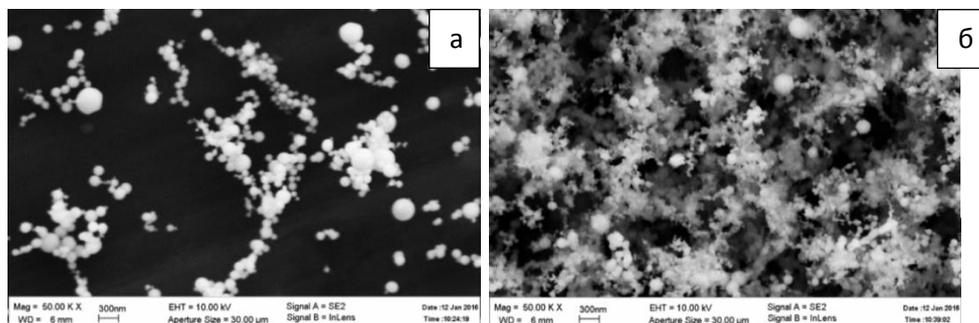


Рис. 2. Напыления PbO (а) и CuO (б), полученные лазерным испарением соответствующих металлов

При облучении сплавов свинца с индием с сопоставимыми концентрациями компонентов сфокусированным лазерным пучком мощностью 35 Вт наблюдается устойчивая генерация тонкой параллельной струи дыма, в которой также было обнаружено образование наночастиц (рис. 3б) с кружевоподобной, развитой структурой, состоящей из наночастиц свинца и его оксида. В то же время на подложке происходит формирование образования в виде трубочки (рис. 3а) внешним диаметром до 4мм. В ее оболочке преобладает оксид индия, чья температура плавления заметно выше температуры кипения оксида свинца. Это способствует росту трубки из оксида индия при лазерном испарении смеси индия и свинца с образованием канала для выхода паров свинца и его оксида, формирования их турбулентного завихрения с соответствующей конденсацией и агломерацией в ватоподобную структуру.

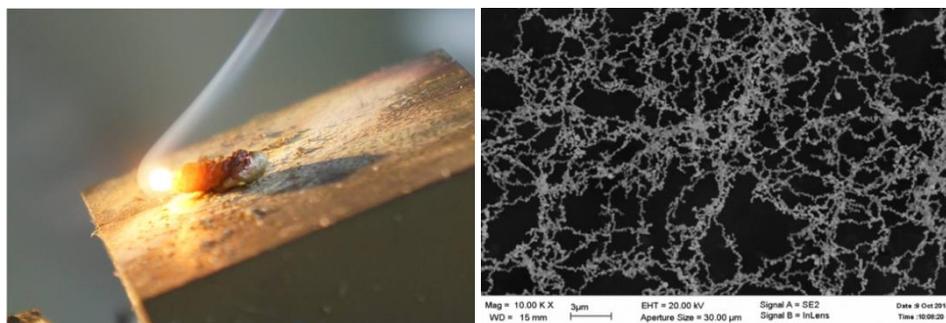


Рис. 3. а – структура в виде трубки из In_2O_3 , б – микрофотография полученной структуры из PbO

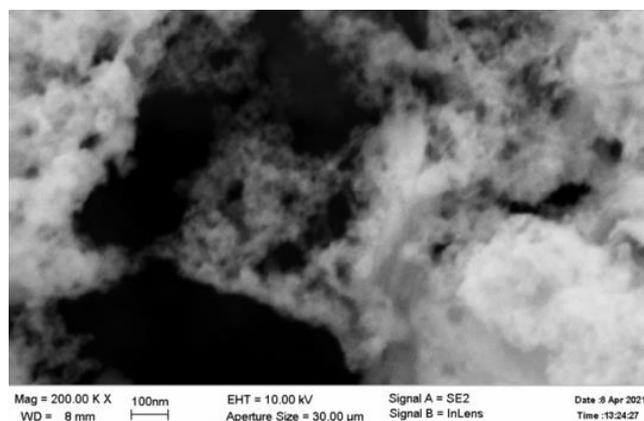


Рис. 4. Агломерат Pb , полученный лазерным испарением свинца в жидком азоте

Если же лазерное испарение металлов производится в жидком азоте импульсным YAG:Nd лазером (1,06 мкм, 70 мДж в импульсе, длительность 20 нс), то наблюдается заметное уменьшение масштаба получаемых наноструктур (рис. 4), что можно объяснить существенно более быстрым охлаждением образуемых лазером паров. При этом тенденция к формированию цепочек из наночастиц и кольцевой фрактальной структуры сохраняется. Также за счет азотной среды удается избежать окисления получаемого продукта и сформировать наноструктуры с металлическим составом и свойствами.

Литература

1. *Mattheu W., Noiurnikan B.* Emerging Nanotechnologies for Renewable Energy. 2021, 624 P.
2. *Gordon E. et al.* Preparation of Quasi-One-Dimensional Metal Heterostructures by Simultaneous Ablation of Two Targets over Superfluid Helium Surface // High Energy Chemistry 54, 2020, P. 164–169.

УДК 536.714

Биоразлагаемые гелеобразующие добавки как промоутеры гидратообразования

Н.С. Молокитина^{1,2}, К.А. Плетнева¹, А.А. Кибкало¹, А.О. Драчук¹

¹ИКЗ ТюмНЦ СО РАН

²Казанский (Приволжский) Федеральный Университет

Гидрат метана представляет собой ледяные твердые соединения молекул воды и метана, образующиеся при отрицательных температурах и высоких давлениях. Молекулы воды образуют полиэдрический каркас с пустотами, который заполняется молекулами газа. Молекулы газа связаны с каркасом воды ван-дер-ваальсовскими связями [1]. Количество публикуемых научных работ в области газогидратных технологий с каждым годом увеличивается. Активно исследуются вопросы о способах борьбы с образованием гидратных отложений в системах добычи, сбора, промышленной подготовки и транспортировки углеводородов [2]. Газогидратные залежи содержат около $3 \cdot 10^{15}$ м³ метана, что способствует изучению способов разработки гидратных залежей [3]. Также ученые всего мира предлагают использование гидратных технологий для транспортировки и хранения природного газа. Однако один из главных факторов, сдерживающих развитие газогидратных технологий транспортировки и хранения природного газа, – это низкая скорость роста гидрата метана [4]. В связи с тенденцией по защите окружающей среды [5], для промотирования гидратообразования необходимо использование экологически чистых и биodeградируемых материалов [6], не наносящих вред окружающей среде.

В нашей работе были использованы гелеобразующие добавки: соевый лецитин, желатин и поливиниловый спирт (ПВС) (табл.1), которые используются в пищевой промышленности.

Таблица 1 Характеристики используемых гелеобразующих добавок. Экспериментальные данные

Наименование гелеобразователя	Производитель	Концентрация, мас%	Вязкость при 20 °С, мПа*с	Степень конверсии воды в гидрат за 250 минут, д. ед.
Соевый лецитин	Германия	3	3,46	0,81
ПВС ВФ-14	Тайвань	3	8,46	0,92
Желатин	Россия	3	2,15	0,48

Добавки, представленные в табл. 1 использовались для приготовления исходных растворов, которые в последующем замораживались и выдерживались при температуре –14 °С. Затем замороженные растворы измельчались и просеивались для выделения 7 г фракции 80–140 мкм в морозильной камере при температуре –15 °С. Измерение массы образца также производилось при –15 °С непосредственно перед загрузкой образца в реактор. Гидратообразование метана проводилось в реакторе высокого давления объемом 60 см³, погруженного в программируемый криостат при температуре –1 °С. Начальное давление задавалось 5 МПа. Реактор был оснащен термopарами и манометром, показания с которых каждую секунду записывались на ПК.

Также методом цифровой оптической микроскопии получены снимки тонких пленок замороженных растворов гелеобразователей (рис. 1) при температуре –15 °С.

На основании полученных снимков очевидно, что морфология тонких пленок исследуемых замороженных растворов отличается, что необходимо учитывать при установлении влияния гелеобразующих добавок на образование гидрата метана в замороженных измельченных растворах.

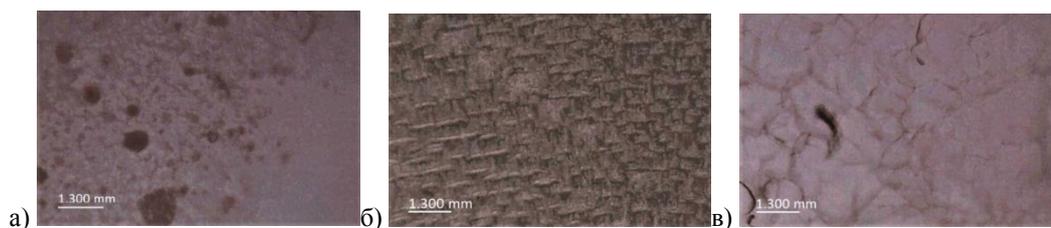


Рис. 1. Микроскопия тонких пленок замороженных растворов гелеобразователей: а – соевый лецитин, б – ПВС, в – желатин

О процессе гидратообразования судили по падению давления внутри реактора. С помощью коэффициента сжимаемости газа (1) по уравнению состояния Пенга–Робинсона, была рассчитана степень конверсии воды в гидрат метана (2):

$$Z = \frac{PV_m}{RT}, \quad (1)$$

$$\alpha = \frac{6M_{H_2O}\Delta m^i}{m_0M_{CH_4}}, \quad (2)$$

здесь $Z^3 - (1-B)Z^2 + (A-2B-3B^3)Z - (AB-B^2-B^3) = 0$, где $A = \frac{\alpha(T)P}{R^2T^2}$ и $B = \frac{b(T)P}{RT}$,

P – давление газа, V_m – молярный объем, T – температура газа, R – универсальная газовая постоянная, b – коэффициент, зависящий от критических параметров, $a(T)$ – коэффициент, зависящий от критических параметров [7], α – степень конверсии воды в гидрат, M_{H_2O} – молекулярная масса воды, $\Delta m^i = \frac{(\rho_z^0 - \rho_z^i)V_z^0}{1 - \beta\rho_z^i}$ – поглощенная масса метана и $\beta = \frac{M_{CH_4} + nM_{H_2O}}{\rho_{hyd}M_{CH_4}} - \frac{nM_{H_2O}}{\rho_{H_2O}M_{CH_4}}$, где ρ_z^0 и ρ_z^i – начальные и конечные плотности газа, M_{CH_4} – молекулярная масса метана, $\rho_{H_2O} = 999,76$ кг/м³. Коэффициент «б» в формуле (2) соответствует гидратному числу для метана, показывающему число молекул воды, приходящихся на одну молекулу метана [1].

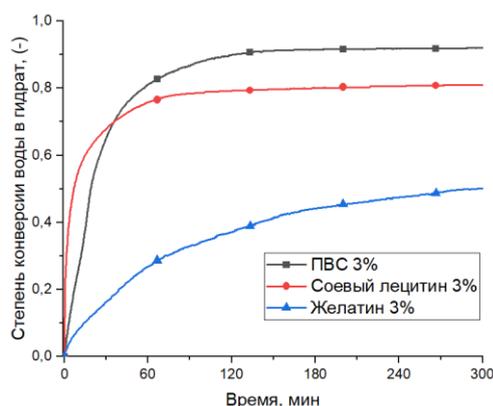


Рис. 2. Степень конверсии воды в гидрат в замороженных молотых растворах

На основании расчетов были построены графики степени конверсии воды в гидрат в замороженных молотых растворах (рис. 1). Было установлено, что наибольшее количество гидрата образовалось в системе замороженного молотого раствора ПВС, тогда как наихудший результат показал желатин, размер кристаллов у которого был наибольший согласно рис. 1.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Тюменской области в рамках научного проекта № 20-43-720002.

Литература

1. *Истомин В.А., Якушев В.С.* Газовые гидраты в природных условиях // М.: Недра. 1992. P. 235.
2. *Zhang Q. et al.* Non-amide zwitterionic poly(sulfobetaine methacrylate)s as kinetic hydrate inhibitors // Chem. eng. sci. 2021. V. 229. P. 7.
3. *Xie Y. et al.* Replacement in CH₄-CO₂ hydrate below freezing point based on abnormal self-preservation differences of CH₄ hydrate // Chem. eng. j. 2021. V. 403. P. 11.
4. *Bhattacharjee G. [e al.].* Kinetic promotion of methane hydrate formation by combining anionic and silicone surfactants: scalability promise of methane storage due to prevention of foam formation // J. chem. P. 26.
5. *Шахмаев П.Н. [и др.].* Биодegradуемые кинетические ингибиторы гидратообразования // Прик. и акад. исслед. Т. 15. 2016. 147-153 сс.
6. *Yaqub S. et al.* Towards a fundamental understanding of biopolymers and their role in gas hydrate; a review // J. of n.g. sci. and eng. V. 91. 2021. P. 16.
7. *Peng D.Y., Robinson D.B.* A new two-constant equation of state // Ind. eng. chem. V. 15. 1976. P. 59–64.

УДК 539.216.2

Структурные и электрофизические свойства пленок WO_x, формируемых импульсным лазерным осаждением для MOSiC сенсоров водорода

А.А. Соловьев, В.Ю. Фоминский

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Проблема мониторинга водорода является актуальной в наше время [1]. Этот газ специально производится в качестве топлива для водородной энергетики, а также выпускается в качестве вторичного продукта в некоторых промышленных процессах. По соображениям безопасности сенсоры водорода необходимы для обнаружения утечки, образование которых приводит к появлению взрывоопасной воздушно-водородной смеси. Датчики водорода на платформе MOSiC являются основным типом устройств, предназначенных для мониторинга водорода в жестких условиях эксплуатации [2, 3]. Данный тип датчика состоит из тонкой пленки каталитически активного металла (М) и пленки оксида металла (О), которые нанесены на кристалл карбида кремния SiC. Традиционно в качестве каталитически активного металла используется Pt или Au, а в качестве оксидного слоя SnO₂, CeO₂, TiO₂, WO₃ и другие. Особый интерес представляет субоксид вольфрама WO_x, обладающий уникальной совокупностью химических и физических свойств. Для гексагональной конфигурации кристалла SiC ширина запрещенной зоны составляет примерно ~ 3,2 эВ. Такая ширина запрещенной зоны способствует высокотемпературной (до 1000 °С) работе датчика.

При взаимодействии с водородом датчик на платформе MOSiC может претерпевать как изменение сквозного тока через структуру, так и сдвиг напряжения в режиме амперометрических измерений (в приложенном/внешнем электрическом поле). Данный тип детекторов является наиболее распространенным и изученным в мире. В последнее время разрабатываются и более оригинальные по архитектуре и принципу функционирования датчики водорода [4, 5]. Однако наиболее перспективным является датчик на базе MOSiC, взаимодействие с водородом которого приводит к возникновению собственной ЭДС, достаточной для ее регистрации традиционным оборудованием (потенциометрические измерения) [6, 7]. В данном сенсоре движение электронов и ионов вызвано химическими и температурными явлениями, а не приложенным электрическим полем.

В работе были получены высокотемпературные датчики водорода на платформе MOSiC (металл-оксид металла-карбид кремния). Пленки оксида вольфрама создавались методом импульсного лазерного осаждения (ИЛО) в регулируемых условиях. Датчики имели существенную корреляцию газосенсорных свойств и морфологии, наноструктуры и химического состояния пленок оксида. Сенсорные характеристики образцов WO_x/SiC и Pt/WO_x/SiC анализировали с использованием амперометрических и потенциометрических измерений (рис. 1). Реакция датчиков на водород сильно зависела от качества пленки оксида металла, включая их прочность, однородность, сплошность и адгезию к подложке SiC. Оптимизация ИЛО позволила сформировать относительно эффективные пленки с триклинной структурой WO_{x<3} или моноклинной W₁₈O₄₉ (рис. 2).

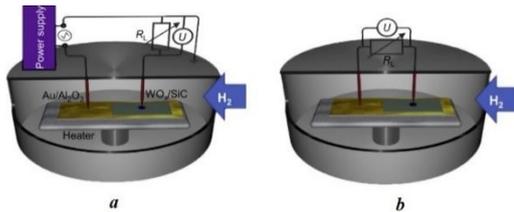


Рис. 1. Амперометрические (а) и потенциометрические (б) измерения электрофизических свойств датчиков Pt/WO_x/SiC и WO_x/SiC в воздушной и воздушно-водородной среде

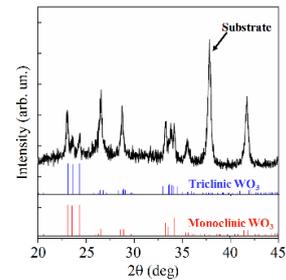


Рис. 2. Рентгеновская дифрактограмма пленки WO_x. Показаны линейчатые дифрактограммы для двух известных фаз триоксида вольфрама

В воздушно-водородной смеси с концентрацией H₂, равной 2% при 300 °С сквозной ток образцов WO_x/SiC, измеренный амперометрическим методом, увеличивался в среднем в 15 раз, а для образцов Pt/WO_x/SiC ток увеличивался до 100 раз. Введение водорода обуславливало появление собственной ЭДС в структуре WO_x/SiC (рис. 3). Используя потенциометрический режим измерения, отклик на H₂ для датчика WO_x/SiC, содержащего металлооксид с фазой W₁₈O₄₉, увеличился более чем в 27 раз (рис. 4, образец WO25). Образцы WO1, WO5, WO10, WO40 данной фазой не обладали. Изменения напряжения данных образцов составляло 55, 160, 110 и 4 мкВ соответственно, в относительных величинах $k = \frac{U(H(2\%))}{U(H(0\%))} \sim 5; \sim 8; \sim 6 \text{ и } \sim 1,1$. Следует отметить, что тонкопленочный слой Pt способствует изменению полярности ЭДС в структуре WO_x/SiC. Воздействие водорода на образцы Pt/WO_x/SiC так же вызвало изменение величины напряжения, однако относительное увеличение отклика сигнала k не превышало трех раз. Таким образом, полученные результаты демонстрируют принципиально новые свойства датчиков водорода на платформе MOSiC, заключающиеся в возможности выявления утечек водорода при повышенных температурах без применения внешних источников питания.

Работа выполнена в рамках госзадания на НИР (FSWU-2020-0035).

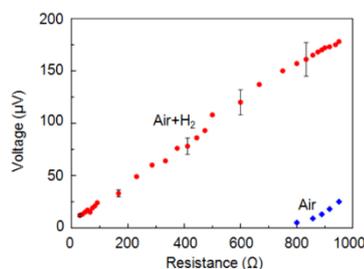


Рис. 3. Зависимость напряжения на нагрузке от ее сопротивления при измерении ЭДС-сигнала для структуры WO_x/SiC

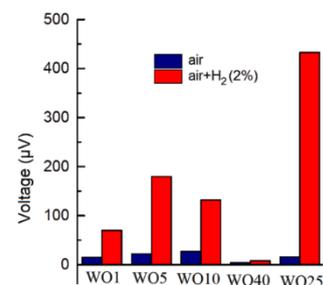


Рис. 4. Диаграмма напряжений на нагрузочном сопротивлении в воздушной и воздушно-водородной среде для различных структур WO_x/SiC

Литература

1. *Tejaswini Sahoo and Paresh Kale*, Work Function-Based Metal–Oxide–Semiconductor Hydrogen // Sensor and Its Functionality: A Review *Adv. Mater. Interfaces* 2021, 2100649.
2. *V.V. Zuev, R.I. Romanov, V.Yu. Fominski, M.V. Demin, V.V. Grigoriev, V.N. Nevolin*, Effect of hydrogen on the electrical characteristics of structural elements of the Pt/WO_x/6H-SiC // *Semiconductors*, 2015, V. 49, N 9, P. 1226–1236. DOI: 10.1134/S1063782615090262.
3. *V.V. Zuev, S.N. Grigoriev, R. Romanov, V.Y. Fominski, M.A. Volosova, M.V. Demin*. Comparative studies of monoclinic and orthorhombic WO₃ films used for hydrogen sensors formation on SiC crystal // *Journal of Physics. Conference Series* 2016. V. 747. 012050. doi:10.1088/1742-6596/747/1/012050.
4. *V.Yu. Fominski, S.N. Grigoriev, R.I. Romanov, A.G. Gnedovets, P.N. Chernyh*, Laser plasma ion implantation and deposition of platinum for SiC-based hydrogen detector fabrication // *Nuclear instruments and methods in physics research, B*, 2013, V. 313, P. 68–75.
5. (DOI 10.1016/j.nimb.2013.08.001).

6. R. I. Romanov, V. V. Zuev, V. Yu. Fominskii, A. G. Gnedovets, M. I. Alymov, Effect of hydrogen on the electrical properties of Ag/WO_x/W thin-film structure exhibiting resistive switching behavior // *Nanotechnologies in Russia*, 2013, V. 8, Nos. 7–8, P. 437–444. (DOI: 10.1134/S1995078013040149).
7. V. V. Zuev, S.N.Grigoriev, V. Yu.Fominski, M.A.Volosova, A.A Soloviev, Influence of hydrogen on the thermoelectric voltage signal in a Pt/WO_x/6H-SiC/Ni/Pt layered structure // *Technical Physics Letters*, 2017, 43, P. 790–793.
8. V. Fominski, R.Romanov, V. Zuev, A.Soloviev, A.Goikhman, K.Maksimova, P. Shvets M.Demin, Comparison of hydrogen detection by WO_x/SiC and Pt/WO_x/SiC structures using amperometric and potentiometric modes of measurement // *Thin Solid Films*, V. 669, 1 January 2019, P. 461–470.

УДК 539.216.2

Влияние условий поверхностного сульфидирования нанокристаллической пленки WO₃ на ее фотоэлектрокаталитические свойства при получении водорода

А.А. Трескова, А.А.Соловьев, В.Ю Фоминский

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

В настоящее время существует нехватка чистого водорода в качестве топлива или сырья во многих отраслях промышленности, в том числе в энергетической, топливной, химической и пр. Одним из перспективных путей его получения является расщепление воды под действием солнечного света с использованием полупроводниковых фотоэлектрокаталитических наноматериалов, обеспечивающих появление неравновесных зарядов и, таким образом, создающих условия для протекания окислительно-восстановительных процессов в электролитах.

В данной работе проводилось изучение структурных, морфологических, физических и электрохимических свойств гибридной структуры WS₂/WO₃/FTO, формируемой термохимическим сульфидированием нанокристаллических пленок оксида вольфрама. В качестве подложки использовалось стекло с пленкой FTO (fluorinated tin oxide, фторированный оксид олова). Осаждение оксида вольфрама производилось путем абляции вольфрамовой мишени в вакуумной камере при остаточном давлении воздуха равном 40 Па. Сульфидирование проводилось в сероводороде при давлении в 48 Па и температурах 350 и 450 °С. Полученные образцы исследовались методами рентгеновской дифракции (РД), сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), комбинационного рассеяния света (КРС). Результаты рентгеновской дифракции показали, что оксид вольфрама имеет достаточно хорошую кристалличность с суперпозицией двух фаз: триклинной и моноклинной (рис. 1). На СЭМ-изображениях видно, что WO₃ состоит из кристаллов, имеющих форму игл толщиной 30–50 нм и высотой примерно 500 нм (рис. 2). Спектры комбинационного рассеяния света указывают на формирование достаточно совершенного по упаковке атомов триоксида вольфрама, а также на формирование 2H-WS₂ фазы в процессе сульфидирования (рис. 3). Сульфидирование наноструктурированных пленок WO₃ привело к уменьшению размеров кристаллов. При этом нанофаза металлооксида могла сохраняться в модифицированных наночастицах (рис. 4).

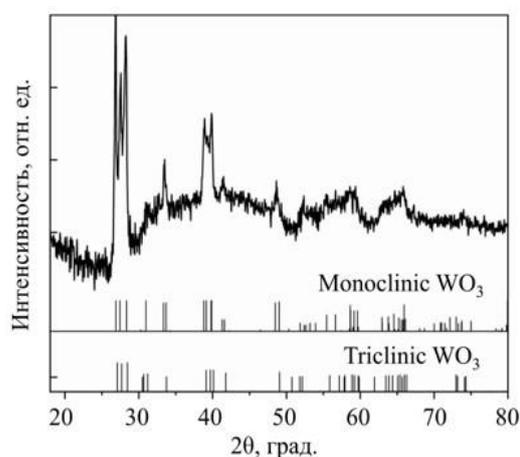


Рис. 1. Рентгеновская дифрактограмма пленки WO₃

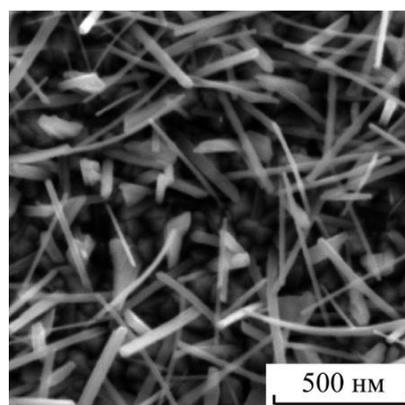


Рис. 2. СЭМ изображение тонкопленочной структуры WO₃ до сульфидирования

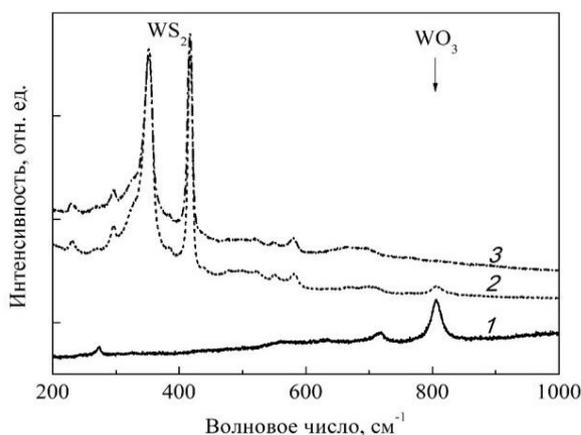


Рис. 3. Спектры КРС для лазерно-осажденных пленочных слоев WO_3 , измеренные до (спектр 1) и после сульфидирования в сероводороде при 350 °C (спектр 2) и 450 °C (спектр 3)

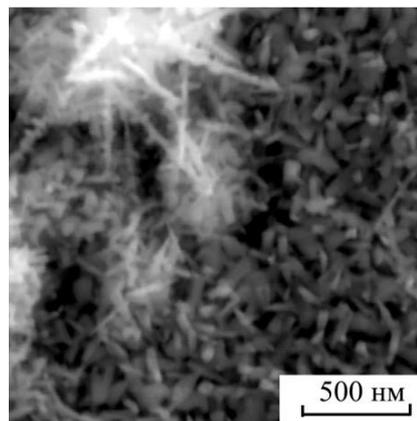


Рис. 4. СЭМ изображение тонкопленочной структуры WO_3 после сульфидирования при 350 °C

Фотоэлектрокаталитические исследования по трёхэлектродной схеме показали, что выбранные условия обеспечивают высокие каталитические свойства гибридной структуры $\text{WS}_2/\text{WO}_3/\text{FTO}$ при получении водорода. Это было обусловлено разделением фото-генерированных носителей (электронов и дырок) на межфазных границах (гетеропереходах), необходимым для эффективного протекания фотоактивированной реакции выделения водорода по Z-схеме, включающей *n*-типа WO_3 и *p*-типа 2H- WS_2 .

Работа выполнена в рамках госзадания на НИР (FSWU-2020-0035).

УДК 538.945

Практическая реализация сверхпроводящих нейронов

А.С. Ионин^{1,2}, Л.Н. Карелина¹, В.В. Больгинов¹

¹Институт физики твердого тела РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Нейросети все более активно используются в повседневной жизни. Например, они очень эффективны при решении задач по обработке изображений, классификации неупорядоченных баз данных, логистических маршрутов и т.п. Задача обработки больших массивов данных сделала актуальной задачу создания энергоэффективных, быстродействующих логических элементов. Сверхпроводящие логические элементы оперируют в гигагерцовом диапазоне частот и отличаются крайне низкой диссипацией энергии: порядка 1 аJ на переключение. В работах [1–2] были разработаны принципиальные схемы сверхпроводящих нейронов, в которых реализован принцип адиабатических вычислений. Авторами были разработаны элементы, преобразующие входной сигнал согласно распределению Пуассона (σ -нейрон) и реализующий согласно распределению Гаусса (γ -нейрон). Данные функциональные зависимости используются для анализа изображений и построения логистических маршрутов, что является основной задачей нейросетей. В работах [3–4] было показано, что в рамках адиабатического подхода потребление энергии может быть уменьшено вплоть до термодинамического предела.

В целом сверхпроводящий нейрон представляет собой устройство, реализующее специальный вид передаточной функции. Образцы представляли собой многослойные тонкопленочные структуры, содержавшие один или два туннельных джозефсоновских контакта для σ - и γ -нейронов соответственно. Контакты были включены в замкнутые контуры посредством сверхпроводящих линий заранее заданной индуктивности, обеспечивающих необходимую передаточную функцию. Разработанная топология чипов предполагала изготовление контуров над сверхпроводящим экраном, который устранял влияние внешнего магнитного поля и определял индуктивность сигнальных линий. Выходной магнитный поток детектировался при помощи двухконтактного СКВИДа методом индуктивно связанного с выходным контуром нейрона. Были получены передаточные функции, близкие к необходимому виду, и проанализированы возможные причины отклонений.

Литература

1. Кленов Н.В., «Принципы построения сверхпроводниковых искусственных нейросетей» Материалы Международной научно-технической конференции, 20–24 ноября 2017 г.
2. Щеголев А.Е., Кленов Н.В, Соловьев И.И., Терешонок М.В. Адиабатические сверхпроводящие ячейки для энергоэффективных нейронных сетей // Журнал радиоэлектроники, ISSN 1684-1719, N9, 2016
3. Soloviev Igor I., Klenov Nikolay V., Bakurskiy Sergey V., Kupriyanov Mikhail Yu., Gudkov Alexander L. and Sidorenko Anatoli S., «Beyond Moore's technologies: operation principles of a superconductor alternative» Beilstein // J. Nanotechnol. 2017, 8, 2689–2710. doi:10.3762/bjnano.8.269.
4. Bakurskiy S.V., Gudkov A.L., Klenov N.V., Kuznetsov A.V., Kupriyanov M.Yu. and Soloviev I.I. Progress in the Area of New Energy Efficient Basic Elements for Superconducting Electronics. ISSN 00271349, Moscow University Physics Bulletin, 2014, V. 69, N 4, P. 275–286. © Allerton Press, Inc., 2014.

УДК 538.953

Влияние замещения ионов Bi^{3+} ионами Pb^{2+} на термоэлектрические свойства BiCuSeO

Д.С. Пашкова

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Среди наиболее эффективных среднетемпературных термоэлектрических материалов выделяют соединения химического состава BiCuSeO , обладающие химической и термической стабильностью в широком интервале температур. Обладая слоистой кристаллической структурой и тяжелыми атомами в структуре, соединения BiCuSeO обладают чрезвычайно низкими значениями теплопроводности, не превышающими $1 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ при комнатной температуре. Однако наряду с низкой теплопроводностью соединения обладают низкой концентрацией и подвижностью носителей заряда и, как следствие, низкими значениями электропроводности. Также характерной особенностью соединений класса оксиселенидов является наличие вакансий на позиции меди, обуславливающих проводимость p -типа в материале и энергия образования которых близка к нулю. Следствием этого становится существенное влияние метода получения, в частности, использования механического помола на термоэлектрические свойства материала. В частности, работе [1] было установлено, что в зависимости от режима помола концентрация и подвижность носителей заряда значительно меняется, что приводит к увеличению значений фактора мощности ($S^2\sigma$).

Помимо метода получения, эффективным подходом, позволяющим оптимизировать электрофизические свойства оксиселенидов висмута, является гетеровалентное замещение ионов висмута, в частности, ионами Pb^{2+} , приводящее к формированию одного носителя заряда (дырки) в расчете на элементарную ячейку. Однако наряду с ростом концентрации в соединениях наблюдается значительное падение подвижности носителей заряда, препятствующее дальнейшему увеличению значений электропроводности. В работе [2] было показано, что наличие вакансий на позиции меди приводит к значительному увеличению подвижности носителей заряда и тем самым приводит к увеличению проводимости. Предполагается, что комбинация упомянутых выше подходов позволит одновременно увеличить как подвижность, так и концентрацию носителей заряда.

В данной работе исследовалось влияние замещения ионов Bi^{3+} ионами Pb^{2+} на термоэлектрические свойства соединений состава BiCuSeO . Образцы номинального состава $\text{Bi}_{1-x}\text{Pb}_x\text{Cu}_{1-y}\text{SeO}$ ($x = y = 0; 0.02; 0.06; 0.08$) были синтезированы методом двухступенчатого твердофазного синтеза с последующим искровым плазменным спеканием. Установлено, что использование промежуточного механического помола в процессе синтеза позволяет получить образцы со средним размером зерен $\sim 1 \text{ мкм}$, что приводит к дополнительному рассеянию носителей заряда на границах, и вследствие этого наблюдается заметное снижение подвижности носителей заряда. Также в работе продемонстрировано, что дополнительные вакансии на позиции меди не оказывают существенного влияния на свойства полученных образцов, в то время как замещение висмута свинцом приводит к увеличению коэффициента Зеебека, а также к уменьшению решеточной составляющей теплопроводности.

Литература

1. Новицкий А.П. Влияние дефектов и замещения висмута редкоземельными элементами на термоэлектрические свойства оксиселенидов BiCuSeO : дисс. канд. ф.-м. наук. М., 2019. 167 с.
2. Liu Y. et al. Remarkable enhancement in thermoelectric performance of BiCuSeO by Cu deficiencies // Journal of the American Chemical Society. 2011. T. 133, № 50. С. 20112–20115.

Резонансное отражение света в лафлиновском состоянии 1/3

Е.И. Белозеров^{1,2}, А.С. Журавлев¹

Институт физики твердого тела РАН

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Двумерные электронные системы в режиме дробного квантового эффекта Холла в последнее время являются объектом научного интереса в связи с тем, что сразу несколько исследовательских групп сообщили о прямом наблюдении в дробном состоянии 1/3 анионов – частиц с не бозевской и не фермиевской статистикой [1, 2]. Экспериментальные проявления анионной статистики были продемонстрированы в условиях холловского изолятора, когда объемные квазичастицы, для которых предсказываются нетривиальные статистические свойства, не вносят вклад в проводимость. При этом доказательство связи между транспортными свойствами дробных краевых состояний и объемных квазичастиц само по себе не является тривиальной задачей [3]. Тем не менее, несмотря на все возможные недостатки, именно магнитотранспортные эксперименты стали прорывом в исследовании квазичастиц, физика которых обсуждалась до сих пор только гипотетически [4].

В представленной работе мы исследуем особенности низкотемпературного (> 0.1 К) резонансного отражения в AlGaAs/GaAs гетероструктурах и показываем, что основные линии резонансного отражения в дробном состоянии 1/3 соответствуют не одночастичным оптическим переходам, а коллективным переходам с рождением и уничтожением нейтральных возбуждений в электронной системе. Фактически, резонансное отражение в этом случае следует рассматривать аналогично двухчастичному рамановскому процессу с сохранением энергии и импульса возбуждающего и рассеиваемого фотонов.

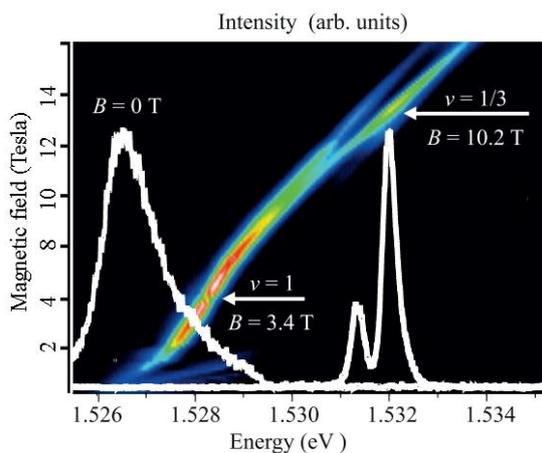


Рис. 1. Динамика спектров нерезонансной фотолюминесценции двумерной электронной системы от магнитного поля в диапазоне магнитных полей 0–12 Тл, измеренная при температуре 0.8 К (амплитуда линий фотолюминесценции показана псевдоцветом). Стрелками указаны факторы заполнения, определенные из спектров фотолюминесценции. Белыми сплошными линиями показаны примеры спектров фотолюминесценции электронной системы при 0 и 10.2 Тл (лафлиновское состояние 1/3)

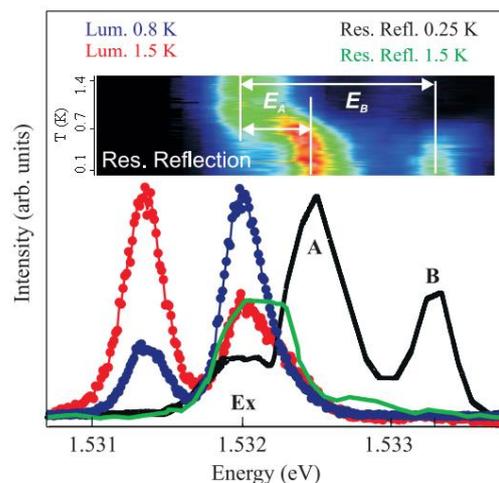


Рис. 2. Спектры резонансного отражения света (сплошные линии) и нерезонансной фотолюминесценции (точки), измеренные при двух температурах, как указано на рисунке. На вставке показана экспериментальная зависимость спектров резонансного отражения в диапазоне температур 0.1–1.5 К (шкала температур нелинейная). Шкала энергий на вставке соответствует шкале энергий основного рисунка

Для исследований была использована узкая высококачественная гетероструктура с одиночной квантовой ямой GaAs/AlGaAs шириной 19 нм, с концентрацией электронов в двумерном канале $0.8 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и подвижностью более $3.5 \cdot 10^7 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, транспортные и оптические свойства которой были подробно исследованы в статье [5]. Гетероструктура помещалась в криостат растворения со сверхпроводящим соленоидом. Оптические измерения проводились в диапазоне температур 0.1–1.5 К и магнитных полей 0–14 Тл с использованием двухсветоводной методики. Один световод служил для

резонансного и нерезонансного возбуждения двумерной системы, а второй – для сбора сигналов резонансного отражения и фотолюминесценции от образца и их передачи на входную щель решеточного спектрометра, оборудованного охлаждаемой ПЗС камерой. Факторы заполнения электронов в условиях стационарного фотовозбуждения контролировалась с помощью упрощенного варианта методики фотолюминесценции, предложенной для исследования дробных состояний КЭХ [5].

Основным экспериментальным результатом работы является температурная зависимость спектра резонансного отражения света на факторе заполнения $1/3$. Суть оптической методики резонансного отражения заключается в упругом рассеянии назад фотонов, полученных от перестраиваемого по длине волны лазерного источника излучения. Изменяя длину волны излучения источника фотонов и регистрируя амплитуду рассеянного излучения, можно изучать эффективность различных каналов упругого рассеяния света от двумерной электронной системы в зависимости от энергии рассеиваемых фотонов. В работе [6] впервые сообщалось о наблюдении в гетероструктуре AlGaAs/GaAs с двумерной электронной системой в дробном состоянии $1/3$ линии резонансного отражения, энергия которой не соответствовала особенностям в двухчастичной плотности состояний возбужденной электрон-дырочной системы, состоящим из дырки в валентной зоне и возбужденному электрону в зоне проводимости гетероструктуры. Причем новая линия наблюдалась только при формировании дробного состояния $1/3$. Учитывая выполнение практически всех условий «скрытой симметрии» [7, 8] для исследуемой квантовой ямы, появление новой линии не находило разумного, подтвержденного теорией, объяснения.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 18-12-00246.

Литература

1. Bartolomei H., Kumar M., Bisognin R., Marguerite A., Berroir J.-M., Bocquillon E., Pla B., Cais, Cavanna A., Dong Q., Gennser U., Jin Y., and F'ève G., Science 368, 173 (2020).
2. Nakamura J., Liang S., Gardner G.C., and Manfra M.J., Nature Phys. 16, 931 (2020).
3. Wen X.G., Mod. Phys. Lett. B 5, 31 (1991).
4. Lerda A., Anyons: quantum mechanics of particles with fractional statistics, Springer-Verlag, Berlin (1992).
5. Кулик Л.В., Журавлев А.С., Белозеров Е.И., Кузнецов В.А., Кукушкин И.В., Письма в ЖЭТФ 112, 516 (2020).
6. Кулик Л.В., Журавлев А.С., Бисти В.Е., Кирпичев В.Е., Ханнанов М.Н., Кукушкин И.В., Письма в ЖЭТФ 100, 659 (2014) [JETP Lett. 100, 581 (2015)].
7. Лернер И.В., Лозовик Ю.Е., ЖЭТФ 78, 1167 (1980) [Lerner I. V. and Lozovik Y. E., JETP 51, 588 (1980)].

УДК 538.94

Исследование магнетизма в антиферромагнетике EuSn_2As_2

*Е.И. Мальцев^{1,2}, И.А. Головчанский³, В.А. Власенко¹, А.В. Садаков¹,
С.Ю. Гаврилкин¹, О.А. Соболевский¹, К.С. Перваков¹*

¹Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В.Л. Гинзбурга, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

³Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

EuSn_2As_2 является гексагональным слоистым соединением, слои Sn-As образуют структуры гофрированных сот, а атомы Eu располагаются в центре сот между двумя слоями Sn-As. Слои Sn-As-Eu-Sn-As связаны между собой силой Ван-дер-Ваальса, что позволяет легко получать тонкие слои данного соединения. Предыдущие работы показали, что данное соединение имеет магнитный переход при 24 К [1, 2] и является антиферромагнетиком (АФМ) типа А, т.е. магнитные моменты упорядочены ферромагнитно внутри слоев и антиферромагнитно вдоль оси c . В работе [2] были произведены измерения зонной структуры методом ARPES с возможностью накачки и было показано, что EuSn_2As_2 является топологическим изолятором (ТИ) с дираковскими поверхностными состояниями. Известно, что в данном семействе существуют соединения, которые обладают такой же структурой и являются ТИ (SrSn_2As_2) и сверхпроводником (NaSn_2As_2). Таким образом, эти соединения представляют собой удобную площадку для исследования топологической сверхпроводимости с майорановскими связанными состояниями.

Для получения соединения EuSn_2As_2 , в перчаточном аргоновом боксе были смешаны металлический Eu и предварительно синтезированный прекурсор SnAs в стехиометрическом соотношении и

загружены в корундовый тигель. После чего тигель был запаян в кварцевую ампулу с остаточным давлением Ar около 0.1 ат. Кварцевая ампула была помещена в печь и нагрета до температуры 850° С, выдержана в течение 12 часов, а затем медленно, со скоростью 2 °С/ч, охлаждена до температуры 550 °С. Выращенные кристаллы обладают слоистой структурой, гладкой зеркальной поверхностью и легко отслаиваются.

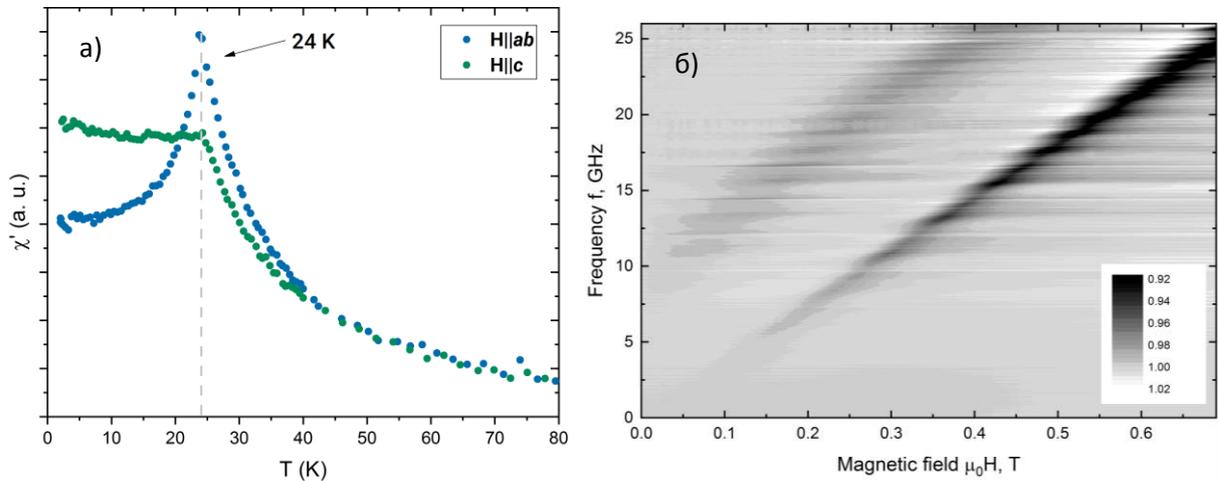


Рис. 1. а) зависимость $\chi'(T)$ EuSn2As2 б) ФМР спектр образца EuSn2As2

Часть выращенных кристаллов была растерта в порошок для снятия порошковой дифрактограммы. Положения пиков и их относительная интенсивность на полученной дифрактограмме совпадают с результатами из работы [1]. Кроме этого состав кристаллов был определен с помощью энергодисперсионной спектроскопии, состав кристалла соответствует стехиометрии. Была измерена зависимость $\chi'(T)$ в ориентациях H||c и H||ab и показано, что при температуре 24 К наблюдается антиферромагнитный переход. Была измерена зависимость намагниченности от поля и температуры, и определены поля насыщения: 3.5 Т при H||ab и 4.7 Т при H||c. Были построены H-T фазовые диаграммы для обоих направлений поля (рис. 2).

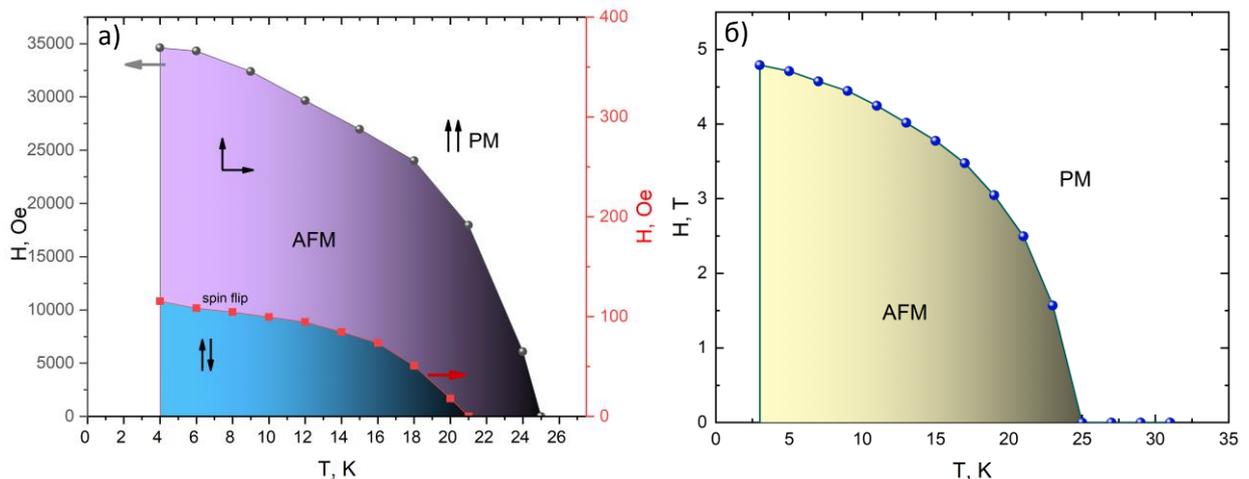


Рис. 2. Фазовые диаграммы H-T соединения EuSn2As2 при а) H||ab, б) H||c

Дополнительно были проведены эксперименты по исследованию ферромагнитного резонанса. По результатам данного эксперимента был подтвержден А тип антиферромагнетика и обнаружены две резонансные моды.

Работа выполнена на базе ЦКП ФИАН в рамках гранта РФФИ № 21-52-12043.

Литература

1. *Arguilla, M.Q, [et al.] // Inorganic Chemistry Frontiers 4.2 (2017): 378–386.*
2. *Li, Hang et al. // Journal of the Physical Society of Japan, 86.12 (2017): 123701.*
3. *Huan-Cheng, Chen et al. // Chinese Physics Letters 37.4 (2020): 47201.*

УДК 539.3

Соударение профилированных медных цилиндров с жесткой стенкой: эксперимент и микроструктурный анализ

Е.С. Родионов, В.Г. Лупанов, Н.А. Грачева, П.Н. Майер, А.Е. Майер

Челябинский государственный университет

Модификация тестов Тейлора по соударению стержня по наковальне была реализована для случая медных профилированных цилиндров. Цилиндр диаметром 8 мм и длиной в 40 мм был вырезан из медного холоднотянутого прутка бескислородной меди М1, а также был обточен в головной части для получения трех различных форм: 1) уменьшенный цилиндр диаметром 3 мм и длиной 10 мм; 2) такой же уменьшенный цилиндр диаметром 4 мм; 3) усеченный конус диаметром в вершине 2 мм и длиной 20 мм. Образцы запускались с помощью газовой пушки со скоростями до 125 м/с и сталкивались с жесткой наковальней из нержавеющей стали. Для разгона образцов применялся сжатый воздух давлением 5 бар, в области перед ударником создавалось пониженное давление 0.2 бар. В экспериментах реализованы значения истинной деформации порядка 0.5–1 и скорости деформации до $2.4 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$. Форма образцов подобрана таким образом, чтобы повысить деформации и скорости деформации на ударном конце. За счет этого удается получить скорости деформации, характерные для экспериментов с не профилированными цилиндрами такого же диаметра, но запущенными со скоростью 150–200 м/с. В случае цилиндров уменьшенного диаметра в головной части деформация близка к однородной по длине головной части, что позволяет сделать прямую оценку напряжения течения и скорости деформации.

Был проведен микроструктурный анализ деформированных и недеформированных образцов. Для недеформированных образцов характерна продольная текстура с полосами локализации, образующимися при получении холоднокатаного прутка. Для деформированного образца характерно наличие трещин в месте перехода от головной части уменьшенного диаметра в основную часть цилиндра. В головной части фиксируется множество пор, а пластическая деформация при соударении меняет текстуру.

Проведено трехмерное моделирование соударения и сравнение с результатами выполненных экспериментов. Для описания пластической деформации применена модель дислокационной пластичности, ранее верифицированная для ударно-волновых задач по соударению пластин металлов. Модель реализована в трехмерном случае с использованием численной схемы гидродинамики сглаженных частиц (SPH). Также модель включает уравнение состояния, реализованное в виде искусственной нейронной сети (ИНС) и обученное по данным молекулярно-динамического (МД) моделирования равномерного изотермического растяжения и сжатия меди. Окончательный вид образцов полученных в эксперименте и рассчитанных по модели совпадает с хорошей точностью.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 20-79-10229).

УДК 537.622.4

Магнитная анизотропия частиц ядро@оболочка

Шипкова Е.Д., Комлев А.С., Перов Н.С.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Одним из наиболее перспективных способов лечения раковых заболеваний является локальный нагрев опухолевых тканей при помощи воздействия переменного магнитного поля на ферромагнитные частицы. Данная методика позволяет разрушать злокачественные образования, не затрагивая клеток здоровых тканей. Одной из проблем такого лечения является отсутствие биосовместимости у перспективных (с точки зрения калорических свойств) для применения материалов. Для решения этой задачи, предлагается покрывать вводимые в организм человека частицы дополнительным слоем, изготовленным из биосовместимого материала. Однако, для того чтобы реализовать нагрев частиц до определённой температуры в теле человека, желательнее оценить мощность их нагрева. Экспериментально определять нагрев частиц с различным составом и диаметрами является крайне трудоёмкой задачей. Поэтому необходимо разработать универсальную методику, которая позволяла бы оценивать мощность

нагрева частиц на этапе их изготовления. Для этого требуется определить величины константы магнитной анизотропии, что представляется непростой задачей, особенно для композитных наночастиц [1, 2].

Нами представлены исследования по определению эффективной константы магнитной анизотропии у наночастиц типа ядро@оболочка. Рассмотрены наночастицы феррит шпинельной структуры, ядро которых состояло из $ZnFe_2O_4$, а оболочка имела состав $MnFe_2O_4$. Композитные наночастицы отличались друг от друга объемным соотношением ядра и оболочки. Эффективная константа магнитной анизотропии исследуемых образцов рассчитывалась двумя различными методами. Первый метод заключался в определении эффективной константы анизотропии K^1 из условий равенства энергии магнитокристаллической анизотропии K^1V и энергии тепловых флуктуаций $k_B T_B$, которые определяют время релаксации магнитного момента частицы (1):

$$\tau \sim e^{\frac{K^1 V}{k_B T_B}}, \quad (1)$$

где V – объем наночастицы, k_B – постоянная Больцмана, T_B – температура блокировки, экспериментально определенная из ZFC (zero field cooled)-FC (field cooled) кривых. Объем частиц был рассчитан по данным просвечивающей микроскопии. По второму методу, эффективная константа анизотропии K^2 рассчитывалась посредством аппроксимации кривых намагничивания вблизи поля насыщения по закону Акулова [3, 4] (2):

$$M(H) = M_s + P_2 H - \frac{K^2}{M_s H^2}, \quad (2)$$

где M_s – намагниченность насыщения, P_2 – парамагнитная восприимчивость насыщения, H – напряженность магнитного поля.

Полученные двумя способами данные показали высокую степень корреляции между собой. Применение описанных методик определения эффективной константы магнитной анизотропии позволит повысить точность расчетов мощности нагрева композитных наночастиц в переменном магнитном поле.

Работа выполнена с использованием оборудования, приобретенного за счет средств Программы развития Московского университета.
Авторы благодарны за финансовую поддержку от Министерства науки и образования РФ (грант № 075-15-2021-1353)

Литература

1. *Balivada S. et al.* A/Cmagnetic hyperthermia of melanoma mediated by iron(0)/iron oxide core/shell magneticnanoparticles:a mouse study // BMC Cancer. 2010. V. 10. P. 119.
2. *FerreiraAndrade M. C. et al.* Understanding the dependence of nanoparticles magnetothermal properties on their size for hyperthermia applications: A case study for la-sr manganites Nanomaterials. 2021. V. 11, N 7. P. 1826.
3. *Akulov N.S.* Uber den Verlauf der Magnetisierungskurve instarken Feldern // Zeitschrift fur Phys. 1931. V. 69, № 11–12.
4. *Stolyar S.V. et al.* Magnetite Nanocrystals with a High Magnetic Anisotropy Constant due to the Particle Shape. Tech. Phys. Lett. 2019 45, 878–881.

УДК 538.958

Исследование экситонных состояний перовскита $CsPbBr_3:Er_{0.1}$ методами магнитофотолюминесценции и отражения в магнитном поле

С.Н. Терешко

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Институт физики твердого тела РАН

Перовскиты – материалы с составом ABX_3 , где А и В обозначают катионы, а X – анион (обычно кислород или галогены), и структурой $CaTiO_3$, в последние 10 лет привлекающие к себе пристальное внимание научного сообщества. Всё дело в их большом квантовом выходе и хороших транспортных свойствах, которые делают их отличными кандидатами на роль основы для солнечных батарей, лазеров или других оптоэлектронных устройств. Опытные солнечные элементы на основе перовскитов достигают 23% эффективности преобразования энергии [1]. Значительную часть исследований, связанных с

перовскитами, составляют работы, посвященные влиянию различных допантов на свойства таких материалов. Одним из перспективных классов допирующих веществ являются лантаниды, при внедрении их в кристаллическую решетку получается улучшить некоторые оптоэлектрические свойства, например, квантовый выход [2].

Несмотря на то, что в последнее время перовскитами занимается множество научных групп, до сих пор в этой теме есть множество неисследованных вопросов. Мног были выполнены измерения поляризованных компонент фотолюминесценции и отражения белого света от различных граней образца в нулевом магнитном поле и в полях до 6 Тл для определения положения экситона и зеемановского расщепления экситонной линии.

Исследованные образцы представляли собой монокристалл или несколько скрепленных монокристаллов CsPbBr_3 , в которых 10% свинца было заменено эрбием. Возбуждение сигнала фотолюминесценции проводилось импульсным Ti:Sr лазером, генерирующим на длине волны ~ 852 нм, после которого стоял удвоитель частоты. Для измерений отражения образец освещался мощным белым светодиодом, излучение направлялось и регистрировалось из небольшого диапазона углов ($\pm 10^\circ$) относительно нормали. Сигналы фотолюминесценции и отражения снимались при помощи монохроматора с хорошим спектральным разрешением. Для изучения влияния магнитного поля образцы были помещены в криостат со сверхпроводящим соленоидом с магнитным полем до 6 Тл. Измерения выполнялись в геометрии Фарадея при температуре 2 К.

Пример измеренных спектров фотолюминесценции и отражения представлены на рис. 1. Найденная линия фотолюминесценции (рис. 1а) находится на длине волны 534,6 нм ($E_{\text{ph}} = 2,319$ эВ) и имеет ширину 1–1,5 мэВ в зависимости от образца. Кривая отражения (рис. 1б) имеет s-образную форму, характерную для полупроводников в области их экситонного резонанса, из параметров этой кривой было определено положение резонанса для $\text{CsPbBr}_3:\text{Er}_{0.1}$ $E_{\text{ex}} = 2,33$ эВ и продольно-поперечное расщепление $E_L - E_T \approx 5$ мэВ.

При температуре 2 К образцы перовскита имеют орторомбическую структуру с двумя близкими параметрами $a \approx b \approx 8$ Å, и большим параметром $c \approx 11$ Å. На рис. 2 изображены линейно поляризованные компоненты спектров отражения и люминесценции от различных граней образца. Видно, что в обоих сигналах с грани ab расщепление не превышает точность эксперимента. Также на рисунке (рис. 2б) видно, что сигналы отражения от грани ac отличаются по форме и расщеплены, расщепление составляет ~ 850 мкэВ. Расщепление спектров люминесценции несколько меньше и составляет ~ 200 мкэВ.

В магнитном поле циркулярно-поляризованные компоненты спектра отражения и фотолюминесценции расщепляются по энергии, как показано на рис. 3. В поле 5 Тл величина расщепления спектров отражения составила около 800 мкэВ, отсюда мы можем определить g-фактор экситона $g = (\delta E / (\mu_B \cdot B)) \approx 2,8$. Для линии люминесценции расщепление в таком же поле составляет всего 400 мкэВ, уменьшение расщепления может объясняться поляритонной природой фотолюминесцентного излучения.

Образцы были синтезированы в лаборатории «Фотоактивные нанокompозитные материалы» СПбГУ. Выражаю благодарность В.Д. Кулаковскому и А.А. Деменеву за обсуждение результатов и А.В. Емелину за предоставленные образцы.

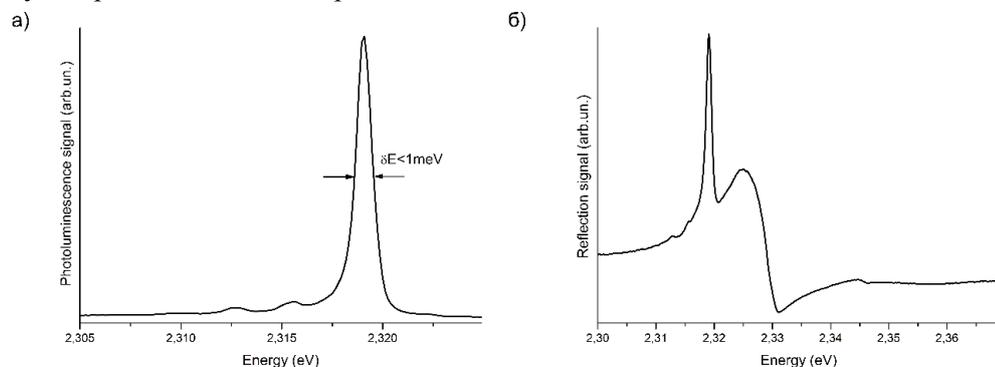


Рис. 1. а) Фотолюминесцентный пик с энергией 2,319 эВ и шириной до 1 мэВ б) S-образная кривая отражения от одной из граней кристалла $\text{CsPbBr}_3:\text{Er}_{0.1}$. Узкий пик в районе 2,32 эВ соответствует линии люминесценции

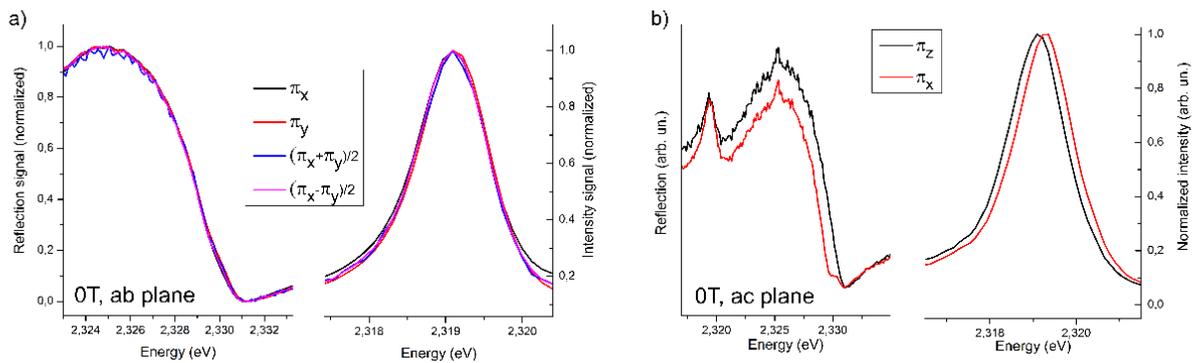


Рис. 2. а) Линейные компоненты поляризации спектров отражения и люминесценции для грани ab. б) Линейные компоненты поляризации спектров отражения и люминесценции для грани ac. Наблюдается расщепление компонент и изменение формы линии отражения

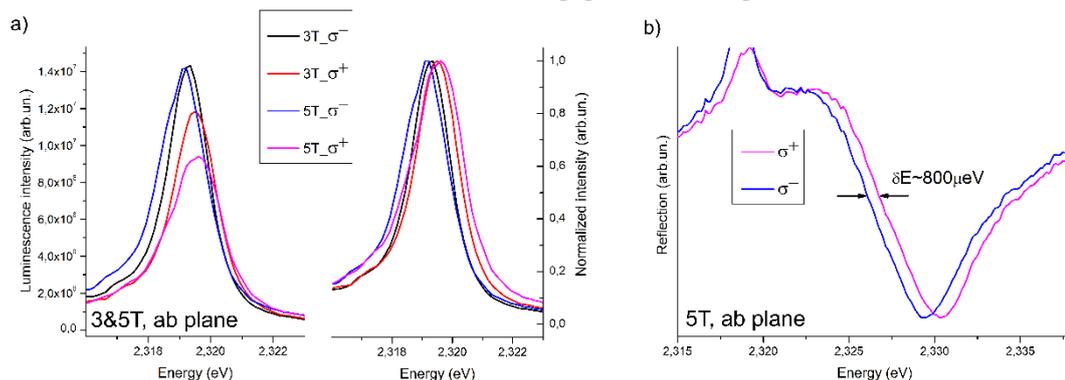


Рис. 3. а) Расщепление циркулярных компонент поляризации сигнала фотолюминесценции в полях 3 и 5 Тл б) Расщепление циркулярных компонент поляризации s-образной кривой отражения от одной из граней кристалла CsPbBr₃:Er_{0.1} в магнитном поле 5 Тл

Литература

1. *Min H. et al.* Efficient, stable solar cells by using inherent bandgap of α -phase formamidinium lead iodide // *Science* (New York, N.Y.) V. 366,6466 (2019): 749–753.
2. *Pan G. et al.* Doping Lanthanide into Perovskite Nanocrystals: Highly Improved and Expanded Optical Properties // *Nano letters* V. 17,12 (2017): 8005–8011.

УДК 537.623

Исследование магнитных свойств кристаллических нано- и микропорошков LiTbF₄ и магнитных аномалий кристаллического LiDyF₄ при низких температурах

*Г.Ю. Андреев¹, И.В. Романова¹, С.Л. Кораблева¹, О.А. Морозов^{1,2},
А.С. Семакин¹, М.А. Черосов¹, А.Г. Киямов¹, М.С. Тагиров^{1,3}*

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет

²Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН

³Институт прикладных исследований АН РТ

Одним из модельных объектов физики дипольного магнетизма являются двойные фториды (тетрафториды) лития – редких земель, вещества ряда LiRf₄ (R = La-Lu) с кристаллической структурой симметрии $I4_1/a$. Элементарная ячейка содержит два редкоземельных иона в магнитоэквивалентных позициях, которые образуют две подрешётки [1, 2]. LiTbF₄ является изинговским дипольным ферромагнетиком, $T_C = 2.87461(16)$ К, ось лёгкого намагничивания параллельна оси c [3]. LiDyF₄ является дипольным XY-антиферромагнетиком, $T_N = 0.610(15)$ К, плоскость лёгкого намагничивания перпендикулярна оси c кристалла [4].

Наноразмерный порошок LiTbF₄ получен методом гидротермального синтеза с использованием олеиновой кислоты [5]. Синтез проходил в автоклаве при температуре 230 °С в те-

чение шести часов. Изображение наночастиц, полученное на просвечивающем электронном микроскопе, представлено на рис. 1а. Микроразмерные порошки LiTbF₄ и LiDyF₄ получены спеканием порошков фторида лития и фторида соответствующего лантаноида, взятых в пропорциях согласно фазовым диаграммам [2]. Прекурсоры сушились два часа при 150 °С в вакууме 4 · 10⁻³ Па. Образцы синтезированы в стеклографитовом тигле в атмосфере аргона при температуре 600 °С в течение 18 часов. Изображение микрочастиц LiDyF₄ полученное на сканирующем электронном микроскопе представлено на рис. 1б. Характеризация всех порошковых образцов рентгеновской дифракцией показала отсутствие посторонних кристаллических фаз.

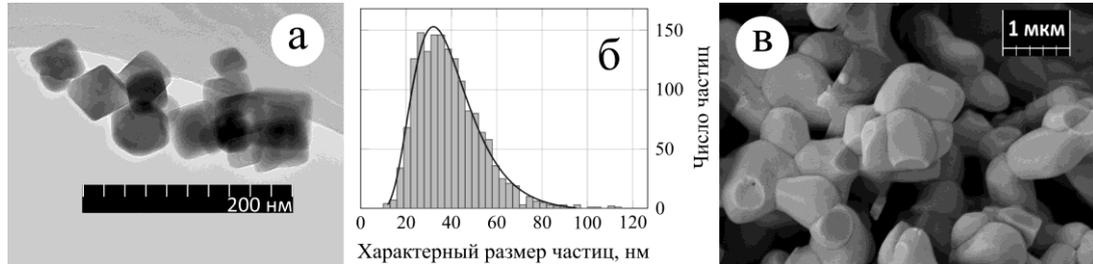


Рис. 1. Изображение наночастиц LiTbF₄, просвечивающий электронный микроскоп (а); распределение характерных размеров наночастиц LiTbF₄ и аппроксимация логнормальным распределением (линия), $x_c = 37$ нм (б); изображение микрочастиц LiDyF₄, сканирующий электронный микроскоп (в)

Измерение намагниченности образцов проводилось вибрационным магнитометром VSM криогенной установки PPMS в диапазоне температур 2–300 К и диапазоне приложенных магнитных полей 0-90 кЭ. Для наноразмерного порошка LiTbF₄ обнаружено уменьшение температуры Кюри $\Delta T_C \sim 0.1$ К по сравнению с микроразмерным порошком и монокристаллом того же вещества.

Температурные и полевые зависимости намагниченности порошковых образцов анализировались теоретически методом диагонализации одноионного гамильтониана \hat{H} редкоземельного иона в полном базисе электронных состояний свободного иона [6]:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{cf} + \hat{H}_{Zee} + \hat{H}^{(P)}. \quad (1)$$

Здесь \hat{H}_0 – энергия свободного иона, \hat{H}_{cf} – кристаллическое поле, \hat{H}_{Zee} – электронное зеемановское взаимодействие с локальным полем:

$$\mathbf{H}_{loc}(s) = \mathbf{H} + \sum_{s'} \mathbf{M}(s') \left(Q(s, s') - \frac{4\pi}{3v} N_m \right), \quad (2)$$

\mathbf{H} – внешнее магнитное поле, $Q(s, s') \mathbf{M}(s')$ – молекулярное поле, $Q(s, s')$ – решёточная сумма Эвальда, $\mathbf{M}(s')$ – магнитный момент иона подрешётки s' , $-(4\pi/3v_0) N_m \mathbf{M}(s')$ – размагничивающее поле, v_0 – объём элементарной ячейки, N_m – размагничивающий фактор. $\hat{H}^{(P)}$ это энергия взаимодействия с однородными деформациями решётки. Намагниченность порошка сферических ($N_m = 1$) частиц на единицу массы образца можно рассчитать следующим образом:

$$M = (\mu_B / 4\pi m) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \text{Sp} \left[\hat{\mathbf{J}} \mathbf{H} / |\mathbf{H}| \exp \left(-\frac{\hat{H}}{k_B T} \right) \right] / \text{Sp} \left[\exp \left(-\frac{\hat{H}}{k_B T} \right) \right]. \quad (3)$$

Теоретические расчёты для LiTbF₄ показали количественное согласие с измерениями, проведёнными для микроразмерного порошка и качественное – для наночастиц. У порошка LiDyF₄ в парамагнитной фазе, при $T < 7$ К экспериментально наблюдались магнитный гистерезис формы «бабочка» (обнаруженный и в монокристалле) и большие (до 40 с) времена магнитной релаксации (см. рис. 2).

Работа выполнена за счёт субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (0671–2020-0051).

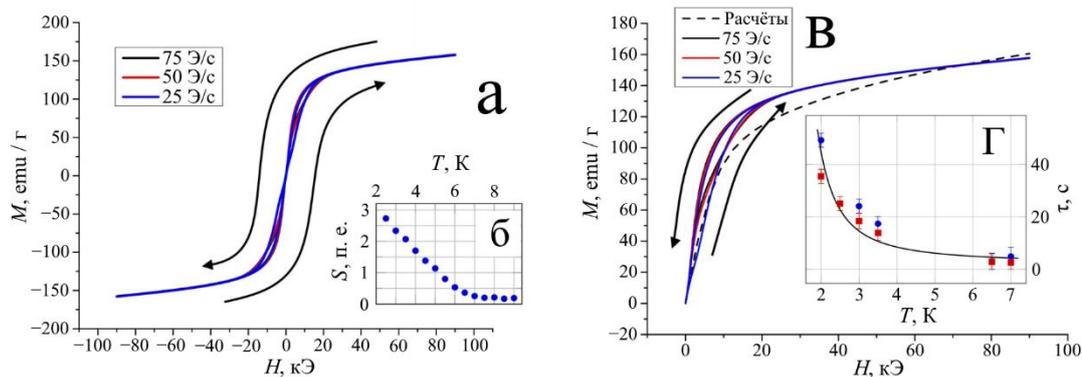


Рис. 2. Магнитный гистерезис микропорошка LiDyF_4 , при температуре 2 К и различных скоростях протяжки поля (а). Стрелки показывают направление изменения поля. Температурная зависимость площадей S петель гистерезиса (б). Верхние петли гистерезиса микропорошка LiDyF_4 , при $T = 2$ К в сравнении с расчётами (в). Температурная зависимость времён магнитной релаксации τ микропорошка LiDyF_4 (г) при намагничивании 0–12 кЭ (квадраты) и размагничивании 90–12 кЭ (кружки), аппроксимированная $\tau = \tau_0 \exp(-\Delta(T)/k_B T)$, где $\Delta(T)$ – рассчитанное и усреднённое по всем направлениям значение расщепления основного крэмперсова дублета иона Dy^{3+}

Литература

1. Aminov L.K., Malkin B.Z., Teplov M.A. Magnetic properties of non-metallic lanthanide compounds // Handbook on Physics and Chemistry of Rare Earths. 1996. V. 22. P. 295.
1. Thoma R.E., Brunton G.D., Penneman R.A., Keenan T.K. Equilibrium relations and crystal structure of lithium fluorolanthanate phases // Inorg. Chem. 1970. V. 9. P. 1096.
2. Als-Nielsen J., Holmes L.M., Krebs Larsen F., Guggenheim H.J. Spontaneous magnetization in the dipolar Ising ferromagnet LiTbF_4 // Phys. Rev. B. 1975. V. 12. P. 191.
3. Mennenga G., de Jongh L.J., Huiskamp W.J. A comparative study of the magnetic ordering specific heats of four $S = 1/2$ dipolar magnets: LiRF_4 ($R = \text{Er, Dy, Ho, Tb}$) // J. Mag. Mag. Mat. 1984. V. 44. P. 48.
4. Zhang Q., Yan B. Hydrothermal Synthesis and Characterization of LiREF_4 ($\text{RE} = \text{Y, Tb-Lu}$) Nanocrystals and Their Core-Shell Nanostructures // Inorg. Chem. 2010. V. 49. P. 6834.
5. Romanova I.V., Tagirov M.S. Magnetic and magnetoelastic properties of non-conducting rare-earth single crystals LiLnF_4 ($\text{Ln} = \text{Tm, Tb, Ho, Dy}$) (Review) // Magn. Res. Solids. 2019. V. 21. P. 19412.

УДК 539.3

Численное моделирование процесса деформации медных ударников

Грачёва Н.А., Родионов Е.С., Лупанов В.Г., Майер П.Н., Майер А.Е.

Челябинский государственный университет

Разработка моделей для описания процесса деформации металлов до сих пор остается актуальной задачей в современной физике. Верификация таких моделей осуществляется результатами экспериментов по деформированию металлов при различных степенях нагрузки. Существуют многочисленные работы по исследованию отклика меди и медных сплавов на статические и динамические нагрузки. В нашей работе мы исследуем процесс деформации ОФНС меди при соударении образцов с жесткой стенкой. Для этого была разработана математическая модель, включающая в себя дислокационную модель пластичности металлов [1, 2] и искусственную нейронную сеть (ИНС) в качестве уравнения состояния. Проведено молекулярно-динамическое (МД) моделирование всестороннего сжатия и растяжения кристалла меди при различных температурах. Результаты МД-моделирования использовались для обучения и тестирования ИНС. Данный подход с использованием бессеточного метода гидродинамики сглаженных частиц позволил описать результаты экспериментов по деформированию профилированных медных образцов различной конфигурации при скоростях столкновения до 125 м/с.

Работа поддержана Минобрнауки РФ (гос. задание № 075-00992-21-00).

Литература

1. Krasnikov V. S., Mayer A.E., Yalovets A.P. Dislocation based high-rate plasticity model and its application to plate-impact and ultra short electron irradiation simulations // Int. J. Plast. 2011. V. 27, P. 1294–1308.

2. *Krasnikov V. S., Mayer A.E.* Influence of local stresses on motion of edge dislocation in aluminum // *Int. J. Plast.* 2018. V. 101, P. 170–187.

УДК 537.6

Уточнение феноменологической теории фазового перехода первого рода для гидрированных сплавов $\text{La}(\text{FeSi})_{13}$

Макарьин Р.А.¹, Карпенков Д.Ю.^{1,2}

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Технология магнитного твердотельного охлаждения уже давно используется для достижения сверхнизких температур, но также может быть использована для создания холодильных установок, работающих вблизи комнатных температур. Технология охлаждения основывается на магнитокалорическом эффекте, который заключается в изменении температуры рабочего вещества при изменении внешнего магнитного поля. Данная работа нацелена на решение проблемы по увеличению эффективности магнитного твердотельного охлаждения путем контролирования температуры Кюри во время протекания цикла, что обеспечивает гораздо большую холодильную мощность, чем системы использования регенерационных колонн с постоянными, но немного отличающимися температурами магнитного фазового перехода первого рода. Одной из основных проблем магнитокалорических материалов является наличие полевого и температурного гистерезиса, которое предлагает использовать давление для смещения точки Кюри и достижения минимального гистерезисного поведения. Дополнительно в работе [1] было показано, что приложение внешнего давления может не только сдвинуть точку Кюри, но и увеличить резкость фазового перехода, что приводит к увеличению магнитокалорического эффекта.

Таким образом, исследование термических, механических и полевых воздействий на магнитные свойства материалов является одним из ключевых аспектов для создания прототипов холодильных систем.

В ходе работы были изготовлена серия образцов тройных магнитокалорических сплавов $\text{La}_{1.12}\text{Fe}_x\text{Si}_{1.4}$, где $x = 11.6, 12.6, 13.6, 14.6, 15.6$, которые в дальнейшем гидрировались для того, чтобы поднять температуры Кюри до значений более чем 330 К.

В работе [2] была предложена феноменологическая модель фазового перехода первого рода, где рассматривался термодинамический потенциал Гиббса.

В данной работе была уточнена модель Бина и Родбелла, в частности было показано, что безразмерный параметр β , который является параметром описывающим чувствительность обменного взаимодействия, является функцией, зависящей от приложенного давления, что обеспечивает нелинейную зависимость изменения объема от приложенного механического давления. В ходе проведенных работ была проведена оценка верхнего предела внутреннего гистерезиса для сплава $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$.

Авторы благодарят за финансовую поддержку Российский научный фонд (№ 21-72-10147).

Литература

1. *Karpenkov D.Yu, et al.* Pressure Dependence of Magnetic Properties in $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$: Multistimulus Responsiveness of Caloric Effects by Modeling and Experiment, *Phys. Rev. Appl.* 13, 034014 (2020).
2. *Bean C.P., Rodbell D. S.*, Magnetic disorder as a firstorder phase transformation, *Phys. Rev.* 126, 104 (1962).

УДК 538.915

Исследование релятивистских плазменных возбуждений в частично экранированных двумерных электронных системах

А.М. Зарезин^{1,2}, В.М. Муравьев¹, П.А. Гусихин¹, И.В. Кукушкин¹

¹Институт физики твердого тела РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Плазменные возбуждения в двумерных электронных системах (ДЭС) изучаются теоретически и экспериментально на протяжении более чем 50 лет. Такой повышенный интерес связан с тем, что электромагнитный отклик данных систем существенно отличается от случая трехмерных материалов,

а свойства двумерных плазменных возбуждений можно изменять в широком диапазоне, меняя концентрацию электронов, прикладывая магнитное поле или модифицируя диэлектрическое/металлическое окружение ДЭС. В квазистатическом пределе дисперсионный закон двумерных плазмонов имеет вид [1]:

$$\omega_p(q) = \sqrt{\frac{n_s e^2}{2\epsilon\epsilon_0 m^*}} q, \quad (1)$$

где q – волновой вектор плазмона, n_s – концентрация двумерных электронов, e – заряд электрона, ϵ и ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость окружения ДЭС и диэлектрическая постоянная, соответственно, m^* – эффективная масса электронов. При полной экранировке ДЭС близким металлическим затвором спектр плазмонов значительно модифицируется и принимает линейный вид [2].

Несмотря на столь обширные исследования, недавно в ДЭС с частичной металлической экранировкой было обнаружено новое семейство плазменных возбуждений [3–5], физически отличающееся от хорошо известных случаев как экранированных, так и неэкранированных двумерных плазмонов. В частности, оказалось, что для случая электрического соединения металлического затвора и ДЭС в данном семействе возбуждается особая низкочастотная плазменная мода – релятивистский плазмон [6]. Данная мода демонстрирует ряд интересных и необычных свойств: возбуждение на неожиданно низких частотах, нетривиальное поведение в магнитном поле, а также зависимость свойств от внешней электрической цепи, подключенной между ДЭС и металлическим затвором.

В настоящей работе представлено исследование плазменных возбуждений в частично экранированной ДЭС в форме диска с центральным затвором в форме диска меньшего диаметра. Схематический вид образцов показан на верхних вставках к рисунку 1(а). Эксперименты проводились на GaAs/AlGaAs гетероструктурах. Плазменные резонансы детектировались с помощью бесконтактной неинвазивной оптической методики, основанной на высокой чувствительности спектра люминесценции двумерного электронного газа к резонансному разогреву ДЭС. Измерения проводились при гелиевых температурах в криостате со сверхпроводящим соленоидом.

В данной геометрии дисперсионная зависимость дипольно активных плазменных мод отличается от случая полностью экранированного диска только численным коэффициентом [4]. Соответствующая экспериментальная магнитодисперсионная зависимость показана на рис. 1(а) зелеными точками. Однако при электрическом соединении между ДЭС и затвором наблюдается еще одна более низкочастотная мода – релятивистский плазмон [6]. Соответствующие экспериментальные данные показаны красными, синими и фиолетовыми точками на рис. 1(а) для различных длин соединительной проволоки, подключенной между центральным затвором и ДЭС. Резонансная частота релятивистского плазменного возбуждения в представленной геометрии для случая короткозамкнутых ДЭС и затвора определяется следующим выражением [6]:

$$\omega_{rel}(q) = \sqrt{\frac{2}{1/4 + \ln(D/d)}} \sqrt{\frac{n_s e^2 h}{\epsilon\epsilon_0 m^*}} \frac{2}{d} \quad (D/d > 2), \quad (3)$$

где D и d – диаметры ДЭС и центрального затвора, соответственно. h – расстояние от ДЭС до затвора. Стоит отметить, что экспериментальные данные демонстрируют ряд интересных особенностей. Частота релятивистского плазмона асимптотически выходит на постоянное значение в большом магнитном поле, а не стремится к частоте циклотронного резонанса. Резонансная частота, а также магнитное поведение сильно зависят от внешней цепи, подключенной между ДЭС и затвором.

По результатам более подробных измерений построена зависимость нормированной резонансной частоты релятивистского плазмона от параметра запаздывания $A = \sqrt{L_m / L_k}$, где L_m – магнитной индуктивности внешней цепи и L_k – кинетической индуктивности двумерной системы. Экспериментальные данные демонстрируют сильную зависимость свойств релятивистского плазмона от параметров внешней соединительной цепи. В частности, для одной и той же ДЭС резонансная частота может быть изменена практически на порядок путем подключения между ДЭС и затвором внешней цепи с большой индуктивностью.

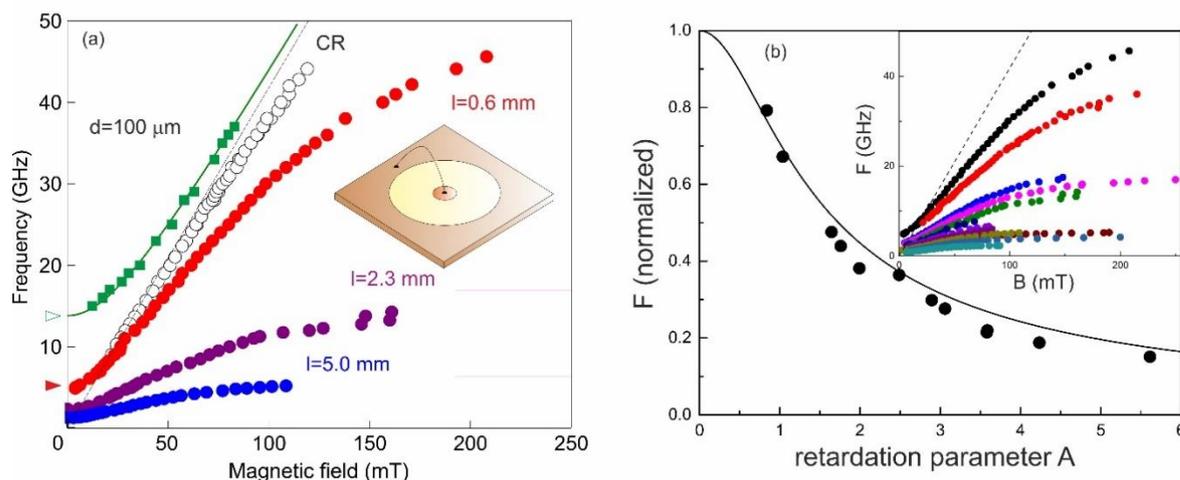


Рис. 1. (a) Магнитодисперсионные зависимости для частично экранированных ДЭС с затвором в форме диска. На вставке – схематический вид образца. Из статьи [6]. (b) Зависимость резонансной частоты релятивистского плазменного возбуждения в нулевом магнитном поле от параметра запаздывания. На вставке – показательные магнитодисперсионные кривые для различных вариантов внешней цепи

Литература

1. Stern F. Polarizability of a two-dimensional electron gas // Phys. Rev. Lett. 1967. V. 18, 546.
2. Fetter A.L. Magnetoplasmons in a two-dimensional electron fluid: Disk geometry // Phys. Rev. B. 1986. V. 33, 5221.
3. Muravev V. M., Gusikhin P. A., Zarezin A.M., Andreev I.V., Gubarev S.I., and Kukushkin I.V. Two-dimensional plasmon induced by metal proximity // Phys. Rev. B. 2019. V. 99, 241406(R).
4. Muravev V. M., Zarezin A.M., Gusikhin P. A., Shupletsov A.V., and Kukushkin I.V. Proximity plasma excitations in disk and ring geometries // Phys. Rev. B. 2019. V. 100, 205405.
5. Зарезин А.М., Гусихин П.А., Андреев И.В., Муравьев В.М., Кукушкин И.В. Плазменные возбуждения в частично экранированных двумерных электронных системах // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 113, 205405.
6. Muravev V. M., Gusikhin P. A., Zarezin A.M., Zabolotnykh A.A., Volkov V. A., and Kukushkin I.V. Physical origin of relativistic plasmons in a two-dimensional electron system // Phys. Rev. B. 2020. V. 102, 081301(R).

УДК 533.922

Исследование электромагнитных плазменных волн в двумерных электронных системах

К.Р. Джикирба, П.А. Гусихин², В.М. Муравьев², И.В. Кукушкин²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт физики твёрдого тела РАН

В работе экспериментально исследован недавно открытый тип плазменных возбуждений в двумерной электронной системе – поперечные электромагнитные плазменные возбуждения. Работа посвящена исследованию взаимодействию таких плазмонов с резонансами Фабри–Перо диэлектрической подложки в «грязном» пределе, когда обратное время релаксации носителей заряда существенно меньше частоты, на которой производится наблюдение. В противоположном чистом пределе данный эффект был изучен в работах [1, 2].

Измерения проводились на образцах чистого кремния с напыленными пленками хрома, в диапазоне 70–380 ГГц. В работе показано, что это взаимодействие приводит к интереснейшему эффекту: при увеличении проводимости электронной системы максимумы в спектре пропускания сначала уменьшаются по величине, а при дальнейшем увеличении проводимости становятся минимумами. То есть, максимумы и минимумы меняются местами (рис. 1). При этом существует граничное значение проводимости, при котором наблюдается выравнивание спектральной характеристики. Что замечательно, данное значение зависит только от диэлектрической проницаемости подложки.

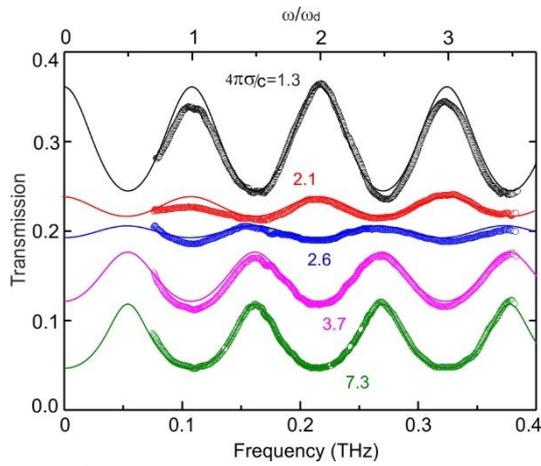


Рис. 1. Зависимость пропускания от проводимости

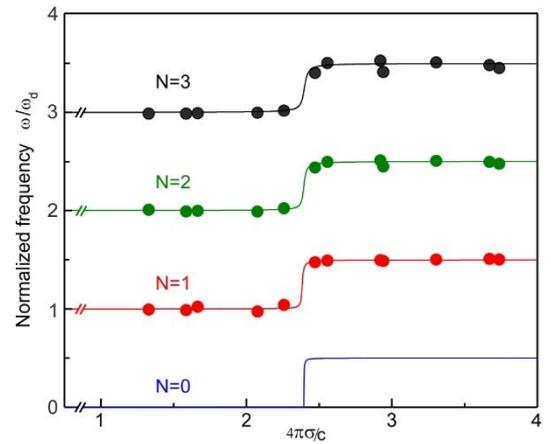


Рис. 2. Положение пиков пропускания в зависимости от проводимости

Частота на рисунках отложена в единицах резонансов Фабри–Перо. Проводимость же в безразмерных единицах – в виде отношения к скорости света. Все формулы приведены в системе СГС.

Литература

1. *Gusikhin P. A., Muravev V. M. and Kukushkin I.V.* Superluminal electromagnetic two-dimensional plasma waves // *Phys. ReV. B*102, 121404(R) (2020).
2. *Shuvaev A., Muravev V. M., Gusikhin P. A., Gospodarič J., Pimenov A., Kukushkin I.V.* Discovery of Two-Dimensional Electromagnetic Plasma Waves // *Phys. ReV. Lett.*126, 136801 (2021).

Секция фотоники и двумерных материалов

УДК 533.9072

Послойный анализ металл-оксидных пленок методом РФЭС

А.В. Виноградова^{1,2,4}, И.А. Базулин^{1,2,3}, К.А. Rogozin^{1,2,3}, А.А. Коньков^{1,2}

¹ Национальный исследовательский университет «МЭИ»

² ГНЦ РФ ТРИНИТИ

³ НИЦ «Курчатовский институт»

⁴ ОАО ВТИ

На сегодняшний день значительный интерес вызывают устройства резистивной памяти с произвольным доступом (англ.: Resistive Random Access Memory – RRAM) [1]. Ключевым элементом такой памяти является мемристор – структура металл-оксид-металл. Оксидный слой разделен на высший оксид и субоксид. Перспективными субоксидами для реализации мемристорной структуры являются субоксиды переходных металлов. В связи с этим возникает необходимость исследования субоксидных структур и способы их получения. Наиболее распространенным методом исследования субоксидных ультратонких пленок является рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) [2]. Целью данной работы является применение методов модификации субоксидной пленки, а также ее исследование методом РФЭС. В работе рассмотрено два способа получения субоксидной пленки. Первый способ – ионное распыление верхнего слоя высшего оксида переходного металла, второй – напыление ультратонкого защитного слоя. Основным компонентом исследуемых мишеней являлся *Nb*, так как он является переходным металлом.

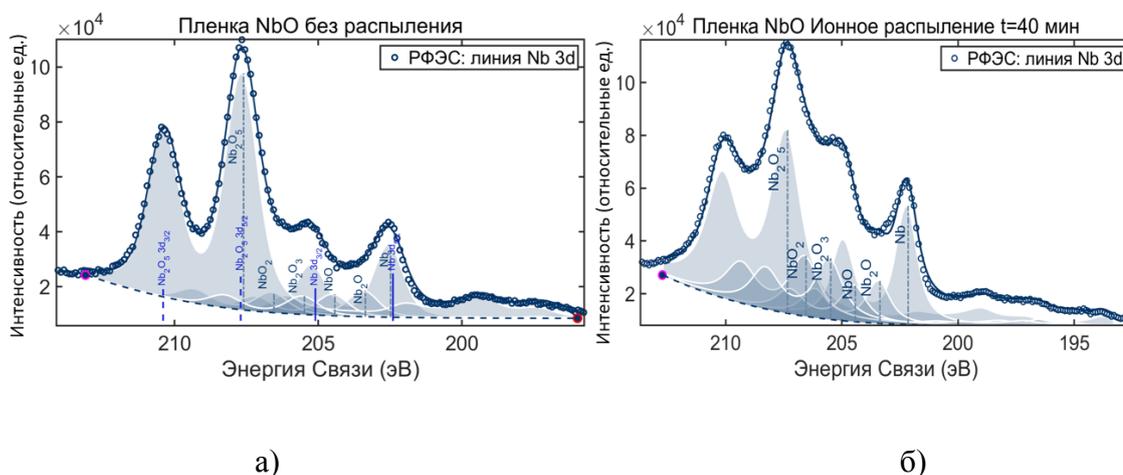


Рис. 1. а) разложение линии *Nb 3d* окисленной *Nb*-пленки; б) разложение линии *Nb 3d* окисленной пленки *Nb*, которая подверглась ионному распылению

Первый способ получения субоксидов – ионное распыление поверхностного слоя. На подложку наносится *Nb* методом магнетронного распыления. Толщина нанесенного слоя составила примерно 10 нм. Далее пленка атмосферно окисляется, вследствие чего на поверхности образовались высшие оксиды *Nb*. После мишень подверглась ионному распылению. Поверхностный слой высшего оксида модифицируется в субоксид. В случае получения субоксида методом нанесения ультратонкого защитного слоя методика изготовления мишени аналогична предыдущей, за исключением нанесенного на поверхность титана. В данном случае титан защищает от полного окисления ниобий, таким образом получается субоксид ниобия, который находится под пленкой полностью окисленного титана. Ионное распыление позволяет уменьшить верхнюю защитную пленку оксида титана, которая неблагоприятно влияет на работу устройства.

На рис. 1 продемонстрировано разложение спектральной линии окисленного $Nb\ 3d$ до и после распыления. Видно, что после распыления образуются субоксидные структуры. На рис. 2 продемонстрированы разложения спектральных линий не только $Nb\ 3d$, но и $Ti\ 2p$, так как структура исследуемой мишени более сложная. Пленка Ti защищает слой Nb от полного атмосферного окисления, в ходе чего образуются субоксиды Nb , количество которых увеличивается после Ar – распыления. Ионное распыление позволяет уменьшить поверхностный слой и сделать его необходимой величины. Также был произведен расчет толщин. Результаты послойного анализа представлены в табл. 1.

Таким образом, в данной работе сформированы многослойные субоксидные пленки Nb и $Nb - Ti$ методом ионного распыления и нанесением защитного поверхностного слоя из Ti . Полученные пленки исследованы методом РФЭС. Проведен послойный анализ ультратонких пленок. Результаты данной работы открывают возможности формирования необходимых субоксидных структур с помощью ионного распыления или нанесения защитного слоя.

Таблица 1. Послойный анализ окисленных пленок Nb , и $Nb - Ti$, который в дальнейшем подвергались ионному распылению

Окисленная пленка Nb	
	Толщина, нм
Углеводородные соединения	0.5
Nb_2O_5	3.5
$NbO_2 + NbO + Nb_2O + Nb_2O_3$	2.3
Окисленная пленка Nb , которая подвергалась распылению ионами Ar^+	
	Толщина, нм
Углеводородные соединения	0.1
$NbO_2 + NbO + Nb_2O + Nb_2O_3$	0.2
Nb_2O_5	2.6
Окисленная пленка $Nb - Ti$	
	Толщина, нм
Углеводородные соединения	0.4
$TiO_2 + TiN_x + TiN$	1.6
Nb_2O_5	0.5
$NbO_2 + NbO_x + Nb_2O$	1.9
Окисленная пленка $Nb - Ti$, которая подвергалась распылению ионами Ar^+	
	Толщина, нм
Углеводородные соединения	0.1
$TiO_2 + TiN_x + TiN$	1.0
Nb_2O_5	0.4
$NbO_2 + NbO_x + Nb_2O$	2.3

УДК 535-46

Топологическая темнота в атомарно тонких пленках дихалькогенидов переходных металлов

Г.А. Ермолаев, К.В. Воронин, Д.Г. Баранов, Д.И. Якубовский, Г.И. Целиков, С.М. Новиков, А.Б. Мазитов, И.А. Круглов, А.А. Вишневы, А.В. Арсенин, В.С. Волков

Центр фотоники и двумерных материалов,
Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Сильное взаимодействие света с веществом [1, 2] в атомарно тонких пленках дихалькогенидов переходных металлов делает их перспективной платформой для множества фотонных приложений [3, 4]. Однако в атомарном масштабе дихалькогениды переходных металлов сами по себе не могут обеспечить желаемый оптический сдвиг фазы $\sim \pi$, необходимый для большинства оптических устройств [3, 4]. Для решения этой задачи мы предлагаем использовать топологическую темноту – топологические фазовые особенности за счет нулевого отклика при отражении, пропускании и рассеянии света. Нам удалось продемонстрировать как теоретически, так и экспериментально, что вокруг этих точек оптическая фаза быстро меняется, что приводит к желаемому скачку на π (Рис. 1). В качестве

практической демонстрации наблюдаемого эффекта мы создали биосенсор на основе атомарно тонкого слоя PdSe₂ с рекордной чувствительностью $7,5 \cdot 10^4$ градуса на единицу показателя преломления, что значительно превосходит даже сенсоры на основе поверхностного плазмонного резонанса с чувствительностью $5,7 \cdot 10^4$ градуса на единицу показателя преломления [5]. Таким образом, наш подход открывает эффективный и технологически простой способ управления оптической фазой в двумерных (2D) материалах.

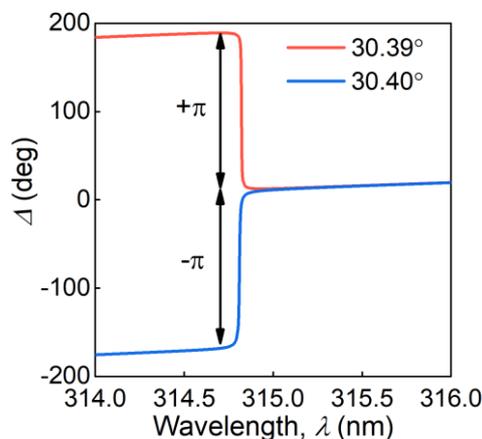


Рис. 1. Оптическая фаза имеет противоположный π -градиент для углов падения немного выше и ниже топологической точки нулевого отражения PdSe₂/SiO₂/Si

Г.А.Е. благодарит за поддержку грант Президента Российской Федерации для молодых ученых и аспирантов.

Литература

1. *Mueller T., Malic E.* Exciton physics and device application of two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors // *npj 2D Mater. Appl.* 2, 1–12 (2018).
2. *Wang G. et al.* Colloquium: excitons in atomically thin transition metal dichalcogenides // *Rev. Mod. Phys.* 90, 021001 (2018).
3. *Lin H. et al.* Diffraction-limited imaging with monolayer 2D material-based ultrathin flat lenses // *Light Sci Appl* 9, 137 (2020).
4. *Ermolaev et al.* <https://arxiv.org/abs/2106.12390>, 2021.
5. *Kravets et al.* Singular phase nano-optics in plasmonic metamaterials for label-free single-molecule detection // *Nature Materials*, 12, 304–309, 2013.

УДК 535.3

Резонансный оптический отклик квазиупорядоченной системы экситонов в квантовых ям InGaN/GaN

А.А. Иванов^{1,2}, В.В. Чалдышев²

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

²Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе

Эффективность и производительность электронных вычислительных систем находится на этапе достижения своего физического предела. Увеличение скорости обработки информации возможно с помощью фотонных устройств, более быстродействующих и менее энергоемких по сравнению со своими электронными аналогами. Для управления световыми потоками необходимо разработать новые принципы и подходы. В частности, такое управление можно осуществить в резонансных брэгговских структурах, в которых периодическое расположение квантовых ям обеспечивает дифракцию света на частоте квазидвумерных экситонов.

В резонансных брэгговских структурах электромагнитное связывание индивидуальных экситонов приводит к формированию сверхизлучающей оптической моды [1]. Резонансные брэгговские структуры на основе квантовых ям InGaN позволяют наблюдать экситон-поляритонный резонанс при

комнатной температуре [2], что является важнейшим фактором для использования суперизлучательной моды экситонных поляритонов в оптических и оптоэлектронных приборах. Поскольку структура реальных гетероструктур с большим числом периодов обычно далека от строго периодической, возникает необходимость в экспериментальных исследованиях квазиупорядоченных систем с целью определения границы допустимых отклонений.

Мы сообщаем об экспериментальной реализации и теоретическом анализе оптических свойств периодической системы из 100 квантовых ям InGaN, разделенных туннельно-непрозрачными барьерами GaN, так что брэгговский резонанс электромагнитных волн мог быть реализован на частоте экситонов в квантовых ямах. Образец был выращен с использованием метода газофазной эпитаксии из паров металлоорганических соединений и имеет некоторую неоднородность толщины слоев. Измерения спектров оптического отражения и пропускания проводились для разных углов падения и поляризаций света при комнатной температуре. Для определения параметров экситонов в квантовых ямах мы используем компьютерное моделирование оптических спектров, основанное на использовании метода матриц переноса, которые строятся на основе формул экситонного отражения и пропускания, приведенных в работе [1]. Предыдущие наши результаты показали, что учет только резонансных особенностей структуры не позволяет описать экспериментальные результаты вблизи энергии запрещенной зоны GaN [3]. Мы улучшили нашу модель посредством учета поглощения в непрерывном спектре состояний квантовой ямы.

Нами верифицирована модель, позволяющая описать экспериментальные данные в широком диапазоне длин волн для различных углов падения и поляризаций света. Параметр радиационного затухания определен равным $0,2 \pm 0,02$ мэВ, а параметр нерадиационного затухания 50 мэВ. В рамках данной модели проведен анализ влияния неоднородности толщин слоев в резонансной брэгговской структуре на ее резонансный оптический отклик. Мы определяем критическое значение беспорядка для структур с квантовыми ямами InGaN.

Литература

1. *Ивченко Е.Л., Несвижский А.И., Йорда С.* Брэгговское отражение света от структур с квантовыми ямами // ФТТ. 1994. Т. 36, № 7. С. 2118–2129.
2. *Chaldyshev V. V., Bolshakov A.S., Zavarin E.E., Sakharov A.V., Lundin W.V., Tsatsulnikov A.F., Yagovkina M.A., Taek Kim and Youngsoo Park* Optical lattices of InGaN quantum well excitons // Appl. Phys. Lett. 2011. V. 99. P. 251103.
3. *Иванов А.А., Чалдышев В.В., Заварин Е.Е., Сахаров А.В., Лундин В.В., Цацульников А.Ф.* Резонансное отражение света оптической решеткой экситонов, сформированной 100 квантовыми ямами InGaN // ФТП. 2021. Т. 55, № 9. С. 733–737.

UDC 535.8

3D creation of various microlenses using two-photon photopolymerization

R. P. Matital¹, D. A. Chubich¹, D. A. Kolymagin¹, A. G. Viktukhnovsky^{1,2}

¹Moscow Institute of Physics and Technology

²Lebedev Physical Institute, Russian Academic of Sciences

Two photon photopolymerization has become crucial in the development of technology of direct laser writing (DLW) for manufacturing microoptics e.g microlenses, free form lens array, multi lens optics, and micro-optical components (1–4). This technique works when the tightly focused femtosecond laser beam generates radicals in small photoresist volume (i.e., voxel) due to two-photon absorption process with subsequent excitation transfer. In micro-optics and photonics structures such as microlenses is an important component for improving the performance and miniaturization of optics and photonics devices.

In the current study our team uses an approach combining a special homemade photoresist «M1» (benzylidene cyclopentanone derivative dye) to fabricate on glass substrate various combinations of microlenses by means of direct laser writing. For this purpose, various surface shapes and composite microlens systems which can be used to develop the performance of optics and photonics components have been designed, optimized using simulation in Zemax and fabricated using the technology of DLW that has been applied in commercial NanoScribe as shown in Fig. 1) the computer model of an aspheric lens. Furthermore,

analysis and characterization of microlens fabricated are also critical for the further development and application. We used confocal microscopy with special parameters to selectively excite dye molecules as well as in an atomic force microscope for the morphology and surface roughness analysis of the spherical and aspherical microlenses fabricated. Fig. 2) shows the confocal microscope image of a multi micro-objective lens at the two surfaces on z position, respectively a) on the lower surface of the lens which consist of a microarray lens and b) on the upper surface which consist of a single aspheric lens. In addition, we compared various shapes of the microlens surface and their optical properties.

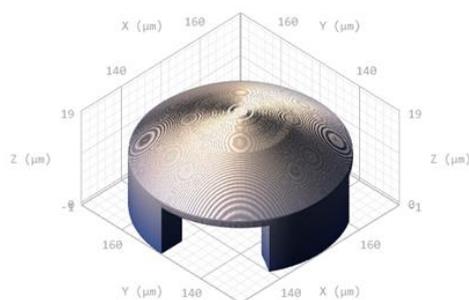


Figure 1. The computer model of aspheric microlens

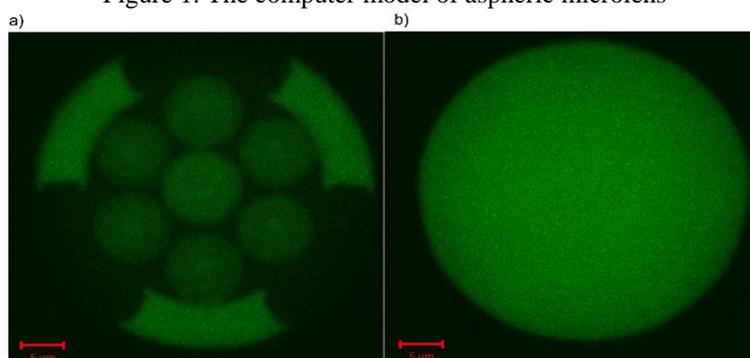


Figure 2. Multi micro objective lens a) lower surface consist of microarray lens, b) upper surface, consist single aspheric lens

Precision control of the shape of the optical surfaces during DLW fabrication allows the creation of microlenses and microlens systems with reduced aberrations and improved optical characteristics. This paves the way for the use of DLW-fabricated microlenses for both telecommunications and X-ray synchrotron optics applications.

Authors would like to thank to A. V. Pisarenko for the Zemax simulations of the microlenses and surface roughness measurements with AFM method. This work was partially supported by the program of Russian Foundation for Basic Research (Project N 18-29-20129) and by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Project N 2021-951-ΦП5-5623-8015).

References

1. Guo R., Xiao S., Zhai X., Li J., Xia A., Huang W. Micro lens fabrication by means of femtosecond two photon photopolymerization // Opt. Express. 2006. V. 14 P. 810-816.
2. Dietrich P. I., Harris R.J., Blaicher M., Corrigan M.K., Morris T.J., Freude W, Quirrenbach A., Koos C. Printed freeform lens arrays on multi-core fibers for highly efficient coupling in astrophotonic systems // Opt. Express. 2017. V. 25. P. 18288-18295.
3. Dietrich P. I., Blaicher, M., Reuter I. et al. In situ 3D nanoprinting of free-form coupling elements for hybrid photonic integration // Nature Photon. 2018. V. 12. P. 241–247.
4. Liu X.Q., Yang S.N., Sun Y.L., Yu L., Bai B.F., Chen Q.D., Sun H.B. Ultra-smooth micro-optical components of various geometries // Opt. Lett. 2019. V. 44. P. 2454-2457.

Оценка термодинамических параметров в низкоразмерных магнетиках при низких температурах

А.К. Нухов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В данной работе исследованы некоторые термодинамические свойства системы ферромагнетиков для низкоразмерного ферромагнитного образца с учётом влияния поверхности. Низкоразмерные системы отличаются существенной неоднородностью распределения носителей заряда, что сопровождается также неоднородным распределением спиновой плотности. Как следствие этого, поверхностные эффекты в низкоразмерных структурах играют существенную роль [1–2]. В рамках классической теории спиновых волн было получено выражение для части обменной энергии, соответствующей влиянию поверхности. Это выражение имеет вид [3]:

$$\text{Im}(\Delta E_{s_2}) = \left(\frac{\alpha^2 AV}{I_0^2 d^2} \right) \cdot \sum \lambda_n(k, \bar{r}), \quad \Delta E_{s_2} = i \cdot \text{Im}(\Delta E_{s_2}) \quad (1)$$

где I_0 – самопроизвольная намагниченность невозмущенной системы, d – среднее расстояние между ближайшими соседними ионами кристалла, A – постоянная обменного взаимодействия соседних узлов, $\alpha = (2\mu_0 / V)^{1/2}$ – нормировочный фактор, $\mu = g\hbar / 2mc = g\mu_B$ есть z проекция спинового магнитного момента атомного носителя намагниченности с магнетомеханическим отношением g и спиновым квантовым числом s . Функция $\lambda_n(k, \bar{r})$ определена $V \cdot \lambda_n(k, \bar{r}) = 2 \cdot \text{Im}(L_0^-(k, \bar{r})) - \int \text{Im}(D_n^+(k, k')) \cdot dr$. Эта функция задаёт закон дисперсии, который в развёрнутом виде представляется следующим уравнением (при выборе нормировочной константы $\alpha = (2\mu_0 / V)^{1/2}$):

$$B^{-1} \cdot \omega_{s_2}(k) = \sum_{m_1, m_2} |g_{m_1}^{jl}(k, k)| \cdot \delta^{ll'} \cdot \mathcal{P}_0 \left\{ \begin{matrix} m_1, m_2 \\ l, j \end{matrix} \right\} (r), \quad (2)$$

с «поверхностными» функциями:

$$\mathcal{P}_0 \left\{ \begin{matrix} m_1, m_2 \\ l, j \end{matrix} \right\} (r) = 2 \mathcal{P}_0 \left\{ \begin{matrix} m_1, m_2 \\ l, j \end{matrix} \right\} (r) - \mathcal{S}_0 \left\{ \begin{matrix} m_1, m_2 \\ l, j \end{matrix} \right\} (r), \quad \mathcal{S}_0 \left\{ \begin{matrix} m_1, m_2 \\ l, j \end{matrix} \right\} (\bar{r}) = \frac{1}{V} \int_V r_l^{m_1} r_j^{m_2} dr$$

и константой $B = 2dA / \hbar$, ($l, j = 1, 2, 3$)

Проиллюстрируем сказанное выше некоторыми выражениями для термодинамических потенциалов, показывающих возможное влияние поверхностного резонанса на равновесные свойства системы. Для простоты, рассмотрим только дельтообразный поверхностный резонанс, когда в частотном спектре резонансное уширение $\Delta = \hbar \cdot \Delta\omega_1 \rightarrow 0$. В случае отсутствия внешнего магнитного поля и исчезающе малой магнитной анизотропии, когда средняя тепловая энергия значительно больше энергии системы в «лоренцевом» поле ($k_B T \gg 2\pi g \mu_B I_0$), термодинамический потенциал ферромагнетического газа равен:

$$\Omega(T, 0; \delta) = \frac{V(k_B T)^{5/2}}{6\pi^2 (\hbar \xi)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} dx}{\exp(x - \delta) - 1}, \quad (3)$$

где $\xi = 4Ag\mu_B / \hbar I_0 d$, $\delta = \Delta / k_B T$.

В наиболее общем случае, когда $\Delta = \Delta(T, H)$. Для теплоёмкости получим следующее выражение:

$$C_V(T, \Delta) = \frac{15}{4} \alpha T^{3/2} \sum_{n=1}^\infty \frac{e^{-n \frac{\Delta}{k_B T}}}{n^{5/2}} - 3\alpha T^{1/2} \frac{\Delta}{k_B} \sum_{n=1}^\infty \frac{n e^{-n \frac{\Delta}{k_B T}}}{n^{5/2}} + \alpha T^{-1/2} \frac{\Delta^2}{k_B^2} \sum_{n=1}^\infty \frac{n^2 e^{-n \frac{\Delta}{k_B T}}}{n^{5/2}} \quad (4),$$

где $\alpha = \frac{V k_B^{5/2}}{8(\pi \hbar \xi)^{3/2}}$ (5)

Как видно из выражения (4), наличие щели в энергетическом спектре приводит к отклонению температурной зависимости теплоёмкости от закона «трёх-вторых» Блоха. В случае же, когда щель $\Delta = 0$, учитывая, что $\hbar\xi = 2Ad^2 = k_B \Theta d^2$ и значение для коэффициента в (5), мы получим следующее:

$$C_v(T, 0) = \frac{15}{32} \frac{\zeta(\frac{5}{2})}{\pi^{3/2}} \frac{V k_B}{d^3} \left(\frac{T}{\Theta} \right)^{3/2} = \alpha_1 T^{3/2} \quad (6),$$

где $\zeta(\frac{5}{2})$ - дзета функция Римана. Таким образом, при $\Delta = 0$ мы возвращаемся к закону «трёх-вторых» Блоха.

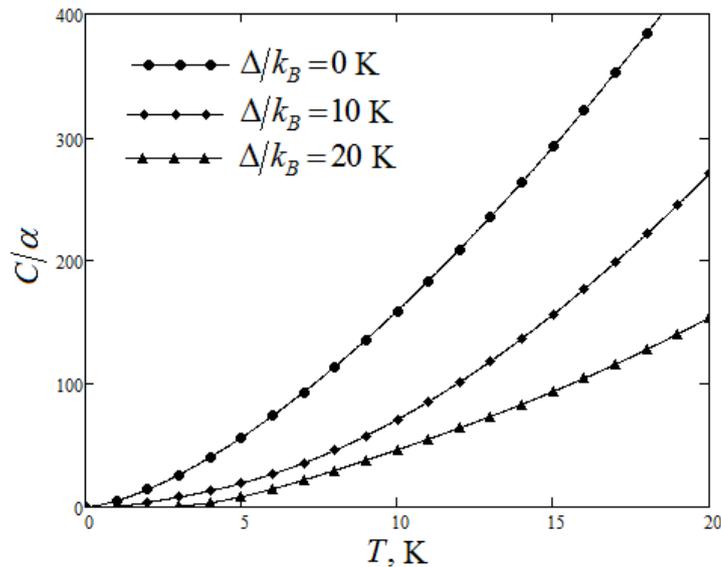


Рис. 1. Температурная зависимость теплоёмкости при различных значениях энергетической щели Δ

Как мы видим из рисунка 1, увеличение щели в энергетическом спектре приводит к ослаблению температурной зависимости теплоёмкости. Кривая же, соответствующая нулевой щели, в точности совпадает с кривой для закона «трёх-вторых» Блоха.

Аналогично можно получить и для самопроизвольной намагниченности

$$I_s(T) = I_0 \cdot (1 - b_1 T^{3/2} + b_2(\delta) \cdot \Delta^{3/2}), \quad (7)$$

с коэффициентами b , соответственно равными

$$b_1 = \frac{\zeta(3/2)}{8\pi^{3/2} \cdot \Theta^{3/2}}, \quad b_2 = \frac{\zeta(3/2)}{3\pi^2 \cdot (k_B \Theta)^{3/2}} \quad (8)$$

где $\zeta(3/2)$ – дзета-функция Римана.

Как и следовало ожидать, наличие щели в спектре приводит к снижению температурной зависимости теплоёмкости газа ферромагнетиков и увеличению его намагниченности, что является следствием общего снижения энергии спиновых волн в условиях поверхностного резонанса.

Литература

1. Катанин А.А., Ирхин В.Ю // УФН. 2007. Т. 177, № 6. С. 639.
2. Birgeneau R. J. et al // Phys. Rev. B. 1988. V. 38, № 10. P. 6614.
3. Нухов А.К., Мусаев Г.М., Казбеков К.К. // ВМУ. Физ. Астрон. 2011, № 5. С. 8.

Стабильность тонких кристаллов CoPS₃ при атмосферных условиях

Ю. А. Клишин, Д. И. Якубовский, М. К. Татмышевский, А. В. Арсенин, Д. А. Казарян, В. С. Волков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

CoPS₃ является слоистым полупроводниковым материалом с выраженными XY-анизотропными магнитными свойствами [1]. Данный материал представляет большой интерес, поскольку имеет уникальные антиферромагнитные свойства, подобные свойствам NiPS₃ [2], а кристаллическая структура со слабым межслоевым ван-дер-ваальсовым взаимодействием позволяет получать тонкие слои методом механического расщепления. Это делает CoPS₃ перспективным двумерным кристаллом, однако вопрос о его стабильности в случае тонких слоев остается открытым.

В настоящей работе методом спектроскопии комбинационного рассеяния исследуется деградация тонких слоев CoPS₃ при нормальных атмосферных условиях. Образцы были получены методом классического механического расщепления при температурах 120-140° С. В качестве подложек использовались Si⁺⁺/SiO₂ и кварц. Полученные тонкие кристаллы отбирались при помощи оптической микроскопии с последующей характеристикой морфологии поверхности и определения толщины методом атомно-силовой микроскопии.

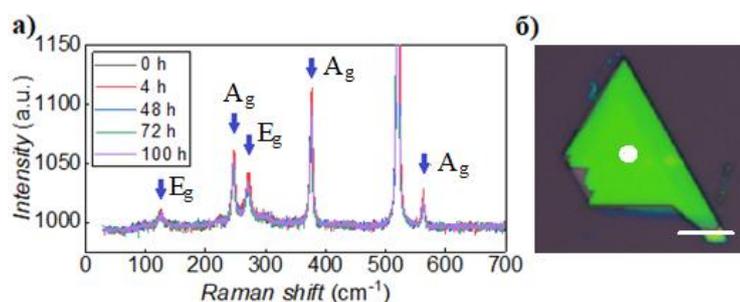


Рис. 1. (а) КР-спектр CoPS₃ на Si/SiO₂. (б) Оптическое изображение кристалла толщиной 200 нм (место снятие спектра указано белой точкой, масштаб 20 мкм)

Для отслеживания процесса деградации применялась спектроскопия комбинационного рассеяния. Параметры получения спектра варьировались в зависимости от толщины исследуемых многослойных кристаллов таким образом, чтобы исключить разрушающее воздействие лазера на материал при максимально возможном полезном сигнале. Использовался лазер с $\lambda=532$ нм, его мощность варьировалась от 3 до 10% от максимальной - 35 мВт. На рис. 1 а) приведены примеры КР-спектров области кристалла на подложке Si/SiO₂, полученные на протяжении 100 часов. Изображение исследуемого образца приведено на рис. 1 б).

Для CoPS₃ при комнатной температуре характерно наличие пяти мод. На основе точечной группы D_{3d} две моды на уровне 149 и 278 см⁻¹ относятся к дважды вырожденным модам E_g, три пика 242, 384 и 585 см⁻¹ – невырожденные моды колебаний A_g [3]. Как видно из графика, соотношение интенсивностей и сама величина интенсивности пиков не претерпевает изменений. Имеющиеся незначительные различия между спектрами не носят систематического характера и объясняются особенностями проведения измерений. Оптическая микроскопия (включая темнопольную) также не выявляет каких-либо изменений. Аналогичные исследования для различных по толщине тонких кристаллов (толщиной от 20 нм), проведенные с разностью в 14 дней также, не демонстрирует каких-либо изменений.

Полученные результаты могут свидетельствовать об отсутствии деградации тонких слоев кристалла при атмосферных условиях. При этом вопрос стабильности однослойных CoPS₃ требует дополнительных исследований. Таким образом, допустимо дальнейшее исследование физических свойств данного материала при атмосферных условиях.

Литература

1. Wildes A.R. et al. The magnetic properties and structure of the quasi-two-dimensional antiferromagnet CoPS₃ // Journal of Physics: Condensed Matter. 2017. Т. 29. № 45. С. 455801.

2. *Wildes A.R. et al.* Magnetic structure of the quasi-two-dimensional antiferromagnet NiPS₃ // *Physical Review B*. 2015. Т. 92. № 22. С. 224408.
3. *Liu Q. et al.* Magnetic order in XY-type antiferromagnetic monolayer CoPS₃ revealed by Raman spectroscopy // *Physical Review B*. 2021. Т. 103. № 23. С. 235411.

УДК 535.012.21, 537.876.4

Моделирование и исследование параметров наноразмерных оптических волноводов нового типа на основе ван-дер-ваальсовых материалов

*И.С. Харичкин¹, А.А. Вишневыи¹, К.В. Воронин^{1,2},
Д.В. Грудинин¹, Г.А. Ермолаев¹, А.В. Арсенин¹, В.С. Волков¹*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Международный физический центр Доноссии

Преодоление дифракционного предела и управление светом на наномасштабах представляют значительный интерес в области интегральной нанофотоники. При этом ранее известные решения по уменьшению поперечных размеров бегущей световой моды, такие как, например, поверхностные плазмон-поляритоны (ППП) на границе металла и диэлектрика, неизбежно связаны с использованием непрозрачных сред, что ведет к потере энергии сигнала и сильному ограничению на размер фотонной схемы.

В работе [1] была впервые теоретически предсказана возможность преодоления дифракционного предела в полностью прозрачных средах за счет оптической анизотропии. Была предложена модель планарного АИА-волновода с ядром из изотропного (I) и оболочкой из анизотропного диэлектрика (A), для которой было показано, что при неограниченном увеличении степени анизотропии материала (отношения out-of-plane к in-plane компонентам тензора диэлектрической проницаемости) эффективная ширина моды неограниченно убывает. В работе [2] была продемонстрирована возможность использования дихалькогенидов переходных металлов (TMDCs) в качестве таких оптически анизотропных сред на примере MoS₂.

В данной работе проводилось моделирование трехмерных волноводов для дальнейшего их изготовления и экспериментального исследования. Было рассмотрено два типа волноводов: ПА и IAI, которые демонстрируют повышенную локализацию ТМ и ТЕ мод соответственно. ПА-волновод представлял собой ядро из аморфного кремния (Si) на основании из TMDC, помещенном на подложке из стекла (SiO₂) в воздушной среде. IAI-волновод состоял из ядра из TMDC материала, помещенном на подложке из SiO₂ в воздушной среде. Расчеты проводились для трех анизотропных материалов: MoS₂, WS₂ и hBN (рис. 1).

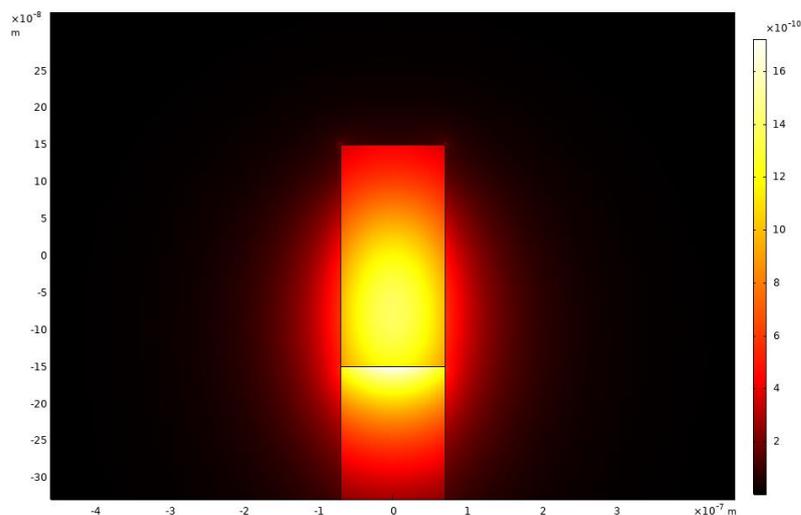


Рис. 1. Пример расчета плотности энергии для ПА-волновода на основе MoS₂

В качестве нормированной эффективной площади моды волны была выбрана величина

$$S_{eff} = \frac{1}{W_{max} R^2} \iint W(x, y) dx dy, \text{ где } W - \text{плотность энергии электромагнитного поля в поперечном сечении}$$
$$\left(\frac{\lambda}{2n_{core}} \right)^2$$

волновода, λ – длина волны в вакууме на данной частоте ($\lambda = 1550$ нм), n_{core} – показатель преломления материала ядра (в случае АІА-волновода). Проведена минимизация эффективной площади моды по ширине (w) и высоте (h) ядра, в результате чего получены оптимальные в этом смысле параметры волновода.

Исследована зависимость связи между модами параллельных волноводов с оптимальными геометрическими параметрами от расстояния между центрами их ядер.

Помимо этого, для волновода оптимальных размеров определена зависимость потерь на закруглении на угол $\frac{\pi}{2}$ от радиуса закругления. Для ускорения расчетов решение уравнений Максвелла в закругленном участке волновода было сведено к определению собственных мод прямого волновода с неоднородным распределением тензора диэлектрической проницаемости и магнитной восприимчивости методами трансформационной оптики [3, 4].

Все вычисления проводились с помощью программы численного моделирования методом конечных элементов Comsol Multiphysics.

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант 20-79-00349).

Литература

1. *Jahani S., Jacob Z.* Transparent subdiffraction optics: nanoscale light confinement without metal // *Optica*. 2014. V. 1(2). P. 96.
2. *Ermolaev G.A. et al.* Giant optical anisotropy in transition metal dichalcogenides for next-generation photonics // *Nat. Commun.* 2021. V. 12. P. 854.
3. *Sun F. et al.* Transformation Optics: From Classic Theory and Applications to its New Branches // *Laser & Photonics Reviews*. 2017. V. 11(6). 1700034.
4. *Han Z., Zhang P., Bozhevolnyi S.I.* Calculation of bending losses for highly confined modes of optical waveguides with transformation optics // *Opt. Lett.* 2013. V. 38(11). P. 1778.

УДК:537.9

Оптимальная асимметрия в детекторах терагерцового излучения, основанных на транзисторах с двумерным каналом

*А. Шабанов¹, М. Москотин¹, В. Белосевич^{2,3}, Я. Матюшкин^{1,3},
М. Рыбин⁴, Г. Федоров¹, Д. Свинцов¹*

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Институт физики, технологии и информационных систем, Московский педагогический государственный университет

³ Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

⁴ Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

В работе была измерена зависимость величины фотоотклика, генерируемого детектором терагерцового излучения, созданного на основе транзистора с графеновым каналом, подключенного по схеме Дьяконова–Шура [1] от расстояния между затвором и истоком элемента (рис. 1). Для этого была создана серия транзисторов с графеновым каналом длиной 4 мкм и шириной 20 мкм на кремниевой подложке, отделенной от него оксидом кремния толщиной 500 нм. Канал был снабжен золотыми контактами и покрыт оксидом алюминия толщиной 100 нм, на котором расположен затвор в одном из пяти положений.

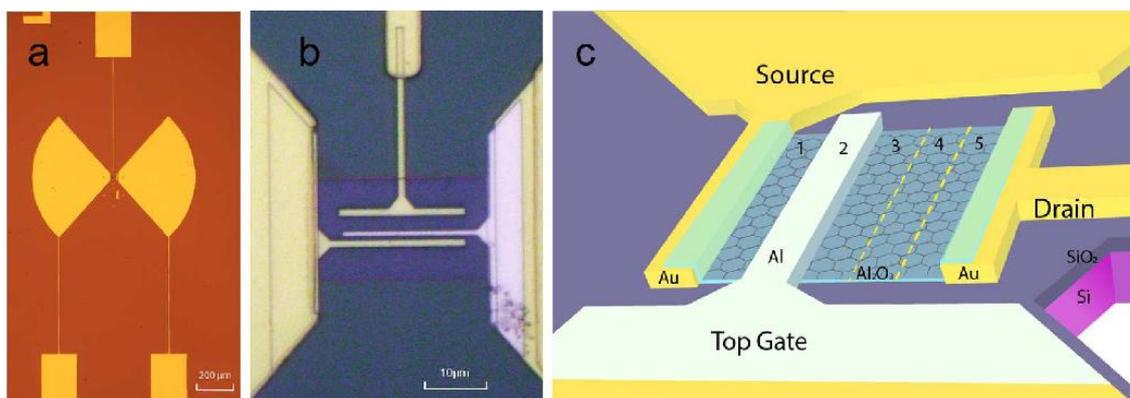


Рис. 1. Детектор ТГц-излучения, состоящий из графенового полевого транзистора, присоединенного к антенне (а) Микрофотография устройства. Размер масштабной линейки 200 мкм (б) Приближенная фотография транзистора в составе детектора. Размер масштабной линейки 10 мкм. (с) Схема детекторного транзистора с асимметрично расположенным затвором. Цифрами обозначена нумерация положений затвора, использованная в работе

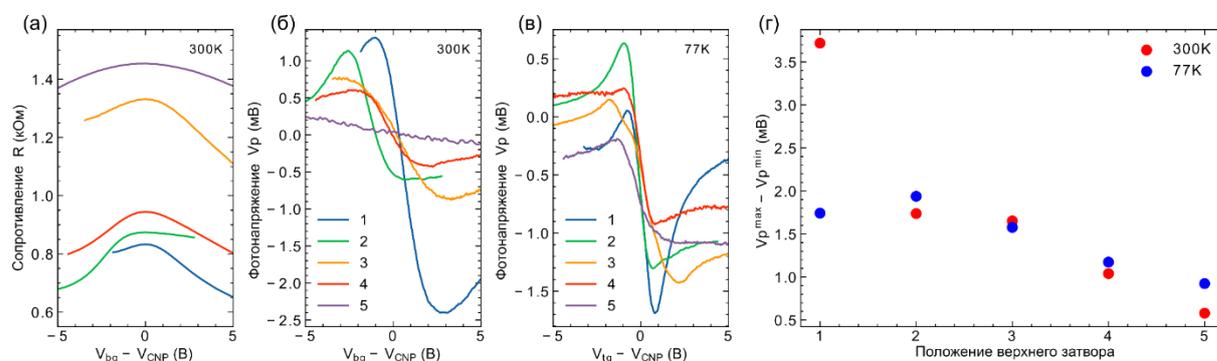


Рис. 2. а) Зависимости сопротивлений каналов устройств с разным расположением затвора от напряжения на нижнем затворе. Все кривые сдвинуты таким образом, чтобы точка электронейтральности V_{CNP} совпала. б) Зависимость фотонапряжения от напряжения на нижнем затворе при освещении устройств излучением на частоте 130 ГГц при комнатной температуре. в) Зависимость фотонапряжения от напряжения на верхнем затворе на тех же устройствах при температуре 77 К. г) Размах фотонапряжения при разных положениях затвора при температурах $T=77$ К и $T=300$ К

В качестве нижнего затвора использовалась кремниевая подложка. Устройства освещались субтерагерцовым излучением частотой 130 ГГц мощностью 1мВт. Фотоотклик измерялся как постоянное напряжение между истоком и стоком транзистора.

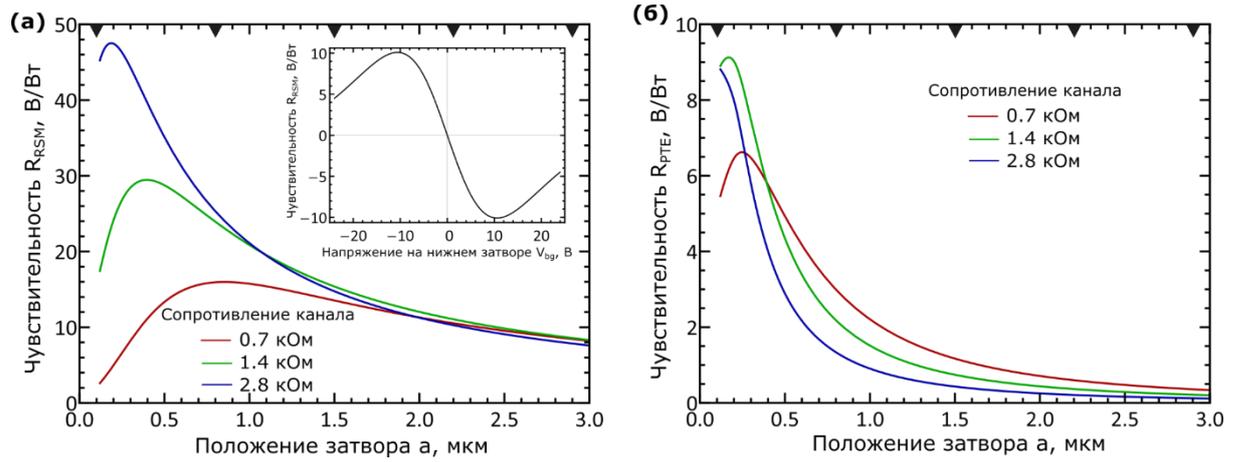


Рис. 3. Теоретически рассчитанные зависимости фоточувствительности резистивного (а) и фототермоэлектрического (б) механизмов выпрямления у устройств с разным расстоянием между истоком и затвором a при разных сопротивлениях канала. Черными стрелками отмечены положения затвора, изученные в эксперименте. На вложенном графике изображена зависимость чувствительности от напряжения на нижнем затворе при $a = 0.5$ мкм. Все зависимости рассчитаны при постоянной энергии Ферми $E=100$ мэВ и разным времени релаксации импульса электрона τ

Результаты измерения (рис. 2) были сравнены с теоретическими расчетами выпрямленного напряжения, генерируемого на элементе фототермоэлектрическим V_{PTE} и резистивным V_{RSM} механизмами выпрямления сигнала (рис. 3).

$$\varphi_{\omega} + k^2 \frac{\delta^2 \varphi_{\omega}}{\delta x^2} = \frac{V}{2} \quad (1)$$

$$\varphi_{\omega}(0) = a \varphi_{\omega}'(0) \quad (2)$$

$$\varphi_{\omega}'(L_G) = 0 \quad (3)$$

$$V_{RSM} = 2 \frac{\delta \sigma(V_{tg})}{\delta V_{tg}} \frac{1}{C\omega} \text{Im} \int_0^{L_G} E(x) \frac{\partial E^*(x)}{\partial x} dx \quad (4)$$

$$V_{PTE} = [S_{ch}(V_{bg}) - S_{con}] [T_d - T_s] \quad (5)$$

$$\frac{\delta}{\delta x} \left(\chi_e \frac{\partial T}{\partial x} \right) - C_e \frac{T - T_0}{\tau_e} = 2\sigma |E_{\omega}|^2 \quad (6)$$

Для расчета выпрямленного напряжения использовалось решение телеграфного уравнения (1) с граничными условиями в подзатворной области (2, 3), подставленное впоследствии в формулы (4, 5), где φ_{ω} – потенциал на расстоянии x от края затвора, ближнего к истоку, $k^2 = \frac{\sigma}{i\omega C}$ – волновой вектор плазмона в канале, V – амплитуда напряжения на антенне, a – расстояние от истока до ближайшего края затвора, L_G – длина затвора σ – проводимость канала, ω – частота сигнала, $S_{ch, con}$ – коэффициент Зеебека в канале и приконтактной зоне, $V_{bg, tg}$ – напряжение на нижнем и верхнем затворах, $T_{s, d}$ – температура канала у истока и стока, χ_e – электронная теплопроводность, C_e – электронная теплоемкость, τ_e – время релаксации энергии электрона.

Решение уравнения имеет два предельных случая при разных. В случае большого сопротивления канала = 1400 Ом, наблюдаемого в эксперименте, оба механизма становятся более чувствительными при сдвиге затвора к истоку, что согласуется с результатами эксперимента, но в противоположном случае, когда реактивное сопротивление емкости затвора преобладает над сопротивлением канала, резистивный отклик показывает противоположный тренд с откликом растущим при отдалении затвора от истока в то время как для фототермоэлектрического отклика оптимальным остаётся положение затвора у источника (рис. 4). Это позволяет в дальнейшем создать серию аналогичных устройств для выявления доминирующего механизма выпрямления сигнала в детекторах, созданных по такой схеме.

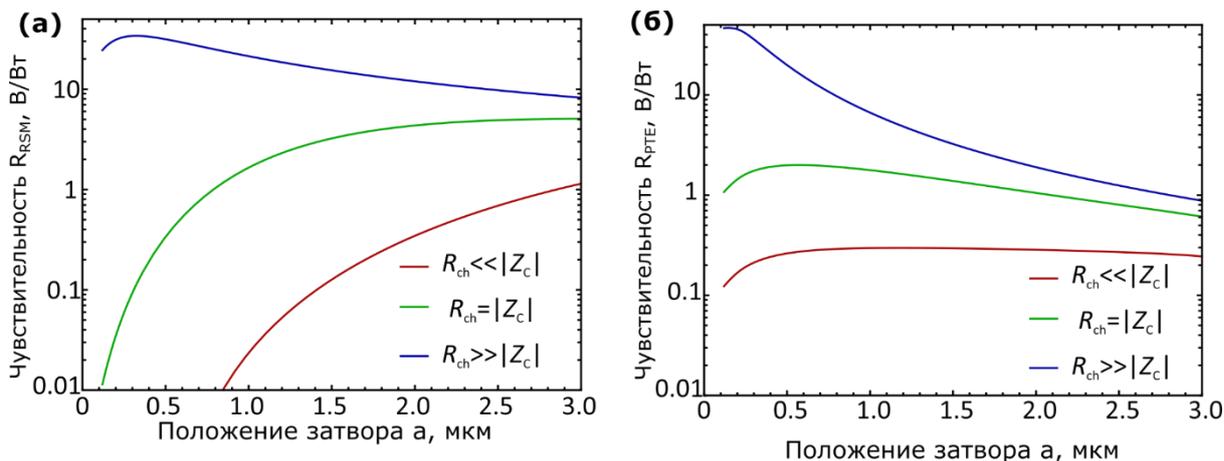


Рис 4. Зависимости фоточувствительности резистивного (а) и фототермоэлектрического (б) механизмов выпрямления при различных предельных случаях соотношения сопротивления канала R и реактивного

$$\text{сопротивления емкости под затвором } |Z_c| = \frac{1}{\omega C}$$

Работа выполнена при поддержке РФФИ и РФФИ.

Литература

1. Dyakonov M. and Shur M., IEEE Transactions on Electron Devices 43, 380 (1996).

УДК 538.958

Оптические свойства наночастиц на основе дихалькогенидов переходных металлов

Д.А. Панова, Г.И. Целиков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время стоит задача синтеза сферических наночастиц для манипуляции электромагнитным полем на наномасштабе. Слоистые дихалькогениды переходных металлов являются перспективным материалом для изготовления таких наночастиц, т.к. обладают высоким показателем преломления. Метод лазерной абляции позволяет решить проблему создания частиц сферической формы, обеспечивая быстрый, простой и экологичный метод синтеза высококачественных и стабильных растворов наночастиц на основе дихалькогенидов переходных металлов, которые могут служить альтернативой кремнию в задачах нанопотоники [1], нанотераностике и биомедицине [2]. Так, биосовместимые лазерно-синтезированные диэлектрические наночастицы могут быть использованы в фототерапии раковых опухолей [3].

В данной работе продемонстрирован синтез сферических наночастиц дисульфидов молибдена и вольфрама (MoS_2 , WS_2) методом фемтосекундной импульсной лазерной абляции объемной мишени в деионизированной воде. В результате проведенного исследования показано, что полученные наночастицы сохраняют слоистую кристаллическую структуру исходной мишени на наномасштабе, вследствие чего обладают высоким показателем преломления ($n > 4$) в широком спектральном диапазоне, а также возможностью поглощать свет видимого диапазона с возбуждением экситонов [4]. Продемонстрировано, что синтезированные коллоидные растворы наночастиц дисульфидов молибдена и вольфрама с контролируемым размером в диапазоне от 30 до 100 нм поддерживают возбуждение экситонных и Ми резонансов в спектральном диапазоне 450–700 нм. Более высокие значения показателя преломления наночастиц на основе MoS_2 и WS_2 , чем у Si и Ge , благоприятны для многих приложений нанопотоники, поскольку позволяют сдвинуть резонанс Ми в область более длинных волн по сравнению с кремниевыми наночастицами того же размера [5].

Для проверки фототермического отклика полученных наночастиц MoS_2 и WS_2 были изучены их спектры комбинационного рассеяния (термический сдвиг рамановских пиков) в зависимости от прикладываемой мощности излучения. Было обнаружено, что одновременное возбуждение экситонного и Ми резонансов в наночастицах MoS_2 и WS_2 приводит к двукратному увеличению фототермиче-

ского отклика по сравнению с Ми-резонансными кремниевыми наночастицами. Таким образом, проведенные исследования показали, что синтезированные с помощью лазерных методик наночастицы дихалькогенидов переходных металлов являются крайне перспективными кандидатами для приложений нанофотоники, где ключевую роль играет усиление взаимодействия света и вещества за счёт электромагнитных резонансов. К числу таких применений стоит отнести лазерную генерацию, биосенсинг, ряд нелинейно-оптических применений и фототерапию.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-00206.

Литература

1. *Mak K.F., Shan J.* Photonics and optoelectronics of 2D semiconductor transition metal dichalcogenides // *Nature Photonics*. 2016. V. 10. P. 216–226.
2. *Wu H. et al.* Biocompatible inorganic fullerene-like molybdenum disulfide nanoparticles produced by pulsed laser ablation in water // *ACS Nano*. 2011. V. 5, N 2. P. 1276–1281.
3. *Kabashin A.V., Timoshenko V.Y.* What theranostic applications could ultrapure laser synthesized Si nanoparticles have in cancer? // *Nanomedicine (London, England)*. 2016. V. 11. P. 2247–2250.
4. *Ermolaev G.A. et al.* Giant optical anisotropy in transition metal dichalcogenides for next generation photonics // *Nat. Commun.* 2021. V. 12, N 854.
5. *Evlukhin A.B. et al.* Demonstration of magnetic dipole resonances of dielectric nanospheres in the visible region // *NanoLett.* 2012. V. 12, N 7. P. 3749–3755.

УДК 538.95

Исследование оптических констант диселенида и дисульфида олова методом спектроскопической эллипсометрии

*М.А. Элсайед^{1,2}, Г.А. Ермолаев¹, И. Якубовский¹, М.К. Татмышевский¹,
А.С. Славич¹, С.М. Новиков¹, Г.И. Целиков¹, А.А. Вишневый¹, А.В. Арсенин¹, В.С. Волков¹*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Faculty of Science, Menoufia University, Egypt

Успешное получение и характеристика графена повлияли на развитие современной фотоники и электроники. На данный момент синтезировано значительное количество монослоев и ультратонких пленок, однако структурные и оптические свойства многих из них практически не исследованы, что препятствует их применению в фотонных и оптоэлектронных устройствах. Среди «двумерных» материалов значительный интерес уделяется дихалькогенидам переходных металлов, что связано с большим разнообразием электронных свойств при схожести методов синтеза и переноса, что позволяет в рамках одного технологического процесса получать сверхтонкие и гибкие оптоэлектронные устройства на основе ван-дер-ваальсовых гетероструктур [1]. Соединения на основе олова (SnS₂ и SnSe₂) обладают сильным оптическим поглощением, и высокой подвижностью носителей заряда [2, 3], что позволяет рассматривать их как перспективные материалы для создания гибких фотодетекторов, фотоэлементов и полевых транзисторов [4, 5] для носимой электроники.

В докладе будут представлены результаты эллипсометрического исследования оптических характеристик слоистого дисульфида и диселенида олова, синтезированных методом химического осаждения из газовой фазы. Эллипсометрические измерения проводились при различных углах падения и в широком спектральном диапазоне, от ультрафиолетового до ближнего инфракрасного излучения [6, 7]. Помимо оптических свойств, изучалась морфология поверхности, микроструктура и химический состав используемых пленок методами спектроскопии комбинационного рассеяния, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

Работа выполнена при частичной поддержке Минобрнауки России (0714-2020-0002) и РФФИ (18-29-02089 и 20-07-00840).

Литература

1. *Lv et al.* *Acc. Chem. Res.* 2015. 48. 56–64.
2. *Huang et al.* *ACS Nano*. 2014. 8. 10743–10755.
3. *Mitzi et al.* *Nature*. 2004. 428, 299–303.

4. *Gedi et al. Appl. Surf. Sci.* 2016. 372. 116–124.
5. *Zhou et al. Advanced Materials.* 2015. 27. 8035–8041.
6. *Ermolaev et al. Nanomaterials.* 2021. 11. 1411.
7. *El-Sayed et al. Nanomaterials.* 2021. 11. 1230.

УДК 53.01

В поисках эффекта Казимира с множественными равновесиями

Д.Г. Баранов, М.И. Краснов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В 1948 году Генрих Казимир предсказал эффект притяжения двух незаряженных идеально проводящих зеркал в вакууме вследствие вакуумных флуктуаций электромагнитного поля [1]. Впоследствии, этот эффект был аналитически описан для систем, включающих не только идеальные проводники, но произвольные реалистичные материалы [2]. С течением времени было исследовано теоретически и проверено экспериментально множество конфигураций данного феномена. При этом в большинстве структур наблюдается именно притягивающий эффект, в том время как нарушение зеркальной симметрии структуры позволяет реализовать отталкивающую силу Казимира [3]. Лишь недавно были найдены системы, реализующие одно устойчивое положение равновесия, причем это достигалось усложнением геометрии, использованием экзотических материалов (например, киральных метаматериалов), или добавлением других взаимодействий (например, электростатики) [3, 4, 6].

В данном докладе, мы представим теоретические результаты, свидетельствующие о возможности создания планарных систем, реализующих не менее двух локальных минимумов вакуумного потенциала. Для этой цели мы рассматриваем эффект Казимира между тонким зеркалом и подложкой с сильной частотной дисперсией показателя преломления. При определенных условиях вакуумный потенциал демонстрирует два локальных минимума.

Данные результаты в перспективе позволят изучать интересные оптико-механические динамические системы, флуктуирующие сразу около нескольких устойчивых точек.

Литература

1. *Casimir H. B. G. On the attraction between two perfectly conducting plates. Kon. Ned. Akad. Wetensch. Proc.* 51, 793–795 (1948).
2. *Klimchitskaya G.L., Mohideen U., Mostapanenko V.M. The Casimir force between real materials: Experiment and theory. ReV. Mod. Phys.* 81, 1827–1885 (2009).
3. *Munday J. N., Capasso F, Parsegian A., V. Nature* 2009, 457, 170.
4. *Tang L., Wang M., C.Y. Ng, Nikolic M., Chan C.T., Rodriguez A.W., and Chan H.B., Measurement of non-monotonic Casimir forces between silicon nanostructures // Nat. Photonics* 11, 97 (2017).
5. *Zhao R., Li L., Yang S., Bao W., Xia Y., Ashby P., Wang Y., Zhang X., Science* 364 (2019) 984.
6. *Munkhbat B., Canales A., Küçüköz B., Baranov D. G., and Shegai T. O. Casimir microcavities for tunable self-assembled polaritons // Nature* 597, 214 (2021).

УДК 538.958

Оптические и терагерцовые свойства органических и неорганических нанотрубок

М.И. Пауков¹, А.Е. Гольдт², Г.А. Командин³, А.В. Сюй¹, А.Г. Насибулин², М.Г. Бурданова¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Сколковский институт науки и технологий

³Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Последние 20 лет одномерные (1D) наноматериалы привлекают особое внимание из-за уникальных оптоэлектронных свойств, возникающих в результате квантового ограничения и кривизны данных материалов в сравнении с двумерными (2D) материалами [1]. В то время как свойства углеродных нанотрубок (УНТ) активно изучались, нанотрубки (НТ) из неорганических материалов, подобные MoS₂НТ, WS₂НТ, WSe₂НТ, изучены мало. Таким образом, основными целями данной работы являются

комплексное изучение оптоэлектронных характеристик WS_2 НТ методами оптической, рамановской и терагерцовой спектроскопии и сравнение с уже изученными данными об УНТ и 2D WS_2 .

Изучаемые в работе тонкие пленки из диспергированных в этаноле WS_2 НТ были получены методом вакуумной фильтрации. УНТ были синтезированы аэрозольным методом [2]. Данные пропускающей электронной микроскопии (ПЭМ) позволили установить, что УНТ изучаемых образцов имеют средний диаметр около 1.8 нм, в то время как диаметры WS_2 НТ широко изменяются в диапазоне 30–100 нм.

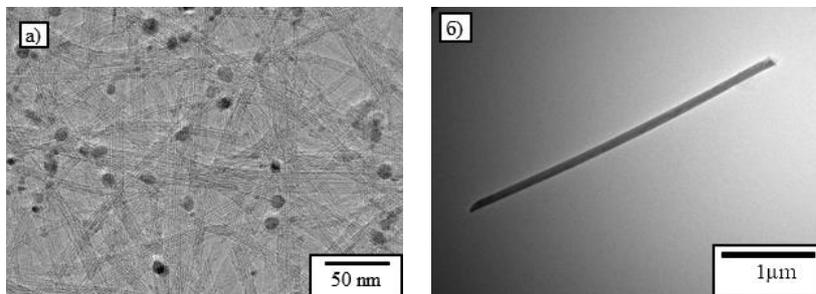


Рис. 1. ПЭМ микрофотография изучаемых образцов: а) пленки УНТ, со средним диаметром 1.8 нм и б) индивидуализированной WS_2 НТ с диаметром 91 нм. Частицы присутствующие между нанотрубками соответствуют катализатору

Оптические свойства тонких пленок НТ были охарактеризованы методами оптической, рамановской и терагерцовой спектроскопии. В спектре поглощения УНТ наблюдаются пики, соответствующие экситонным переходам в полупроводниковых (E_{11}^S , E_{22}^S) и металлических (E_{11}^M) НТ на длинах волн 2300, 1240 и 870 нм соответственно (рис. 2а). С использованием графика Катауры было определено, что средний диаметр УНТ составляет 1.8 нм, что согласуется с данными ПЭМ. В спектрах WS_2 НТ присутствуют пики на 670, 560 и 500 нм, которые также соответствуют экситонным переходам, обозначаемыми в литературе как А, В и С (рис. 2б). Сравнение с данными работы [3] позволяет сделать вывод о том, что все пики поглощения смещены в длинноволновую область на 47 нм в сравнении с WS_2 НТ с диаметром 36 нм, что подтверждает большее значение диаметра в исследуемом образце [3]. Широкий диапазон диаметров УНТ и WS_2 НТ приводит к уширению спектральных линий.

Рамановские спектры при длине лазера $\lambda = 532$ нм позволили выявить радиально-дышащие моды (РДМ), моды УНТ (рис. 2в) с диаметром 1.8 нм. Для WS_2 НТ характерны два пика, соответствующие продольным (E_{2g}^1) и поперечным (A_{1g}) фононным колебаниям на частотах 417 и 351 cm^{-1} соответственно (рис. 2г). Данные моды смещены на 1 и 5 cm^{-1} соответственно в сравнении с однослойным WS_2 и на 2 и 4 cm^{-1} в сравнении с несколькими слоями WS_2 [4], что может свидетельствовать о влиянии кривизны НТ на колебательные моды. Кроме того, ряд пиков, присутствующих около основных, так же как и в случае спектров поглощения, свидетельствует о широком распределении диаметров в образцах УНТ и WS_2 НТ.

На рис. 2д, е приведены действительная и мнимая части удельной проводимости ($\sigma_1 \cdot d$) пленок УНТ и WS_2 НТ. Повышение действительной части проводимости в сторону более низкой частоты (более высокой длины волны) для пленки УНТ согласуется с предыдущими исследованиями пленок с аналогичной морфологией, где проводимость ТГц-диапазона содержит вклад от поглощения свободных носителей, подобной модели Друде, и аксиальных плазмонов [1]. Проводимость WS_2 НТ, напротив, возрастает в сторону высоких частот, что свидетельствует о наличии аксиальных плазмонов с резонансной частотой в дальней или средней ИК-областях.

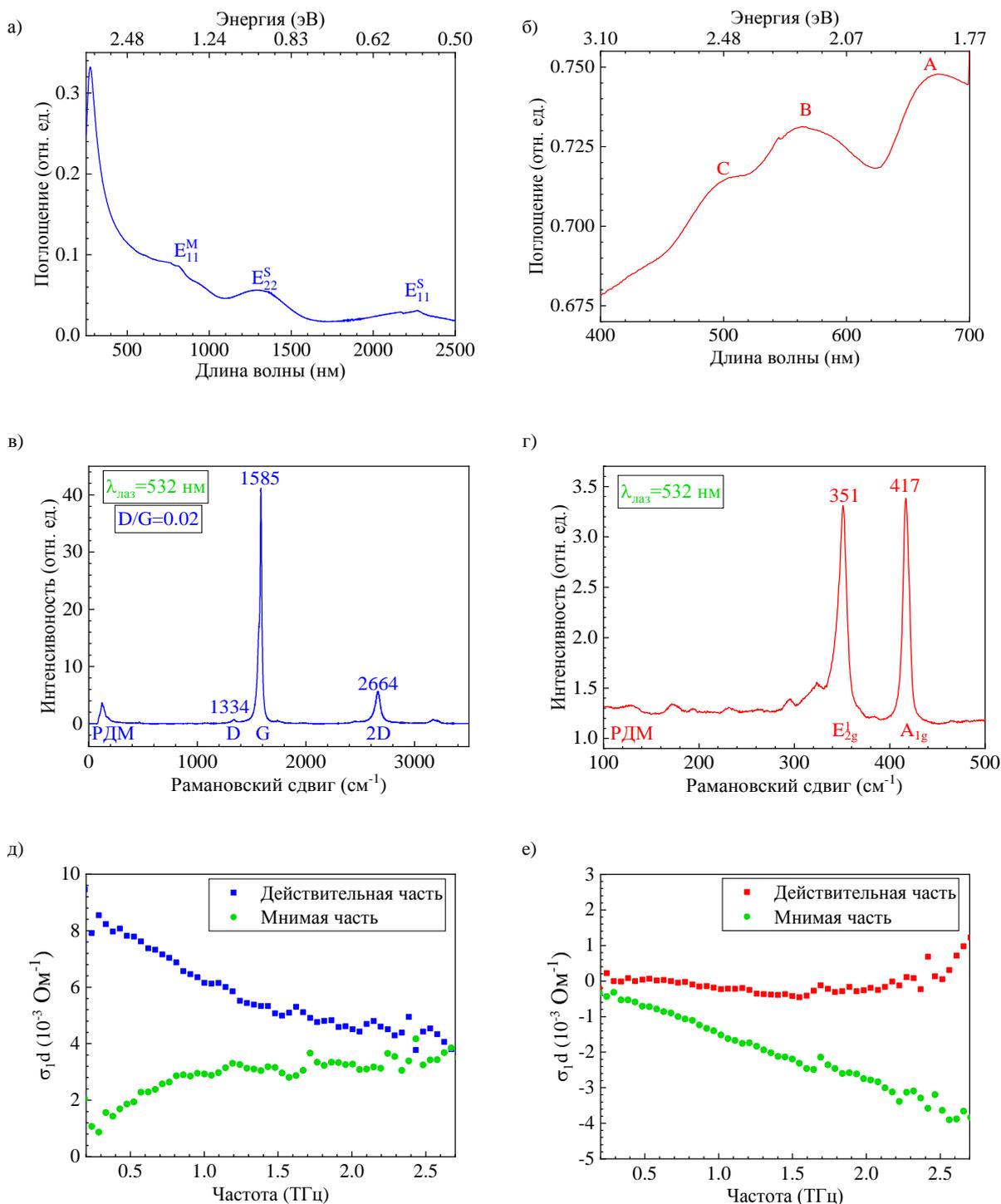


Рис. 2. Оптические и колебательные свойства органических (УНТ, синяя линия) и неорганических НТ (WS₂НТ, красная линия). Спектры поглощения пленок а) УНТ с характерными экситонными пиками E^S₁₁, E^S₂₂, E^M₁₁, и б) WS₂НТ с экситонными пиками А, В и С. Рамановские спектры при длине лазера $\lambda = 532$ нм для пленок в) УНТ и г) WS₂НТ. Спектры действительной и мнимой частей удельной проводимости (σ_{1d}) пленок д) УНТ и е) WS₂НТ

Таким образом, в нашей работе мы показали, что семейство органических и неорганических НТ (на примере, УНТ и WS₂НТ) обладают схожими для всех 1D материалов оптоэлектронными свойствами, связанными с кривизной, квантовым ограничением и локализацией. В частности показано, что все 1D материалы имеют ярко-выраженными экситонные переходы в видимой части спектра даже при комнатной температуре, а также проводимостью, обусловленной наличием локализации свободных носителей заряда, приводящих к образованию аксиальных плазмонов.

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФ № 21-79-10097.

Литература

1. Burdanova, M.G., Tsapenko, A.P., Kharlamova, M.V., Kauppinen, E.I., Gorshunov, B.P., Kono, J., Lloyd-Hughes, J., A Review of the Terahertz Conductivity and Photoconductivity of Carbon Nanotubes and Heteronanotubes. *Adv. Optical Mater.*, 2021, 210104.
2. Nasibulin A.G., Moisala A., Brown D.P., Jiang H., Kauppinen E.I., A novel aerosol method for single walled carbon nanotube synthesis, *Chem. Phys. Lett.*, 2005, 402 (1–3), 227–232.
3. Sinha S.S., Yadgarov L., Aliev S.B., Feldman Y., Pinkas I., Chithaiah P., Ghosh S., Idelevich A., Zak A., Tenne R., MoS₂ and WS₂ Nanotubes: Synthesis, Structural Elucidation, and Optical Characterization. *J. Phys. Chem. C*, 2021, 125 (11), 6324–6340.
4. Wang F., Kinloch I., Wolverson D., Tenne R., Zak A., O'Connell E., Bangert U. and J Young R., Strain-induced phonon shifts in tungsten disulfide nanoplatelets and nanotubes. *2D Mater.*, 2016, 4(1), 015007.

УДК 537.862, 537.874.4, 537.876.4

Фонон-поляритоны в одноосных гиперболических материалах со случайными дефектами

К.В. Воронин^{1,2}, В.С. Волков¹, А.Ю. Никитин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Международный физический центр Доности, Испания

Нанопотоника, изучающая оптические эффекты на масштабах порядка длины волны электромагнитного излучения, в течение последних нескольких десятилетий является одним из самых быстроразвивающихся направлений современной физики. В последние годы было обнаружено значительное количество новых эффектов, явлений и состояний света, таких как поверхностные плазмон-поляритоны, фонон- и экситон-поляритоны [1], поверхностный и локализованный плазмонный резонанс [2], аномальное прохождение через субволновые апертуры [3], гиперболические поляритоны [4], поверхностные, краевые, каналные моды [5,6], топологически защищенные состояния света [7] и другие. Все эти эффекты можно использовать в таких приложениях, как биосенсинг, спектроскопия отдельных молекул [8], фотодетектирование [9], сверхвысокоскоростные методы оптической передачи информации, защищенные криптографические протоколы и так далее.

Потери энергии при распространении света в материалах являются одним из главных факторов, сдерживающих стремительное расширение применимости нанопотоники. Рассеяние на дефектах является важным механизмом затухания электромагнитных мод в оптических наноструктурах. Особенно актуальным учет рассеяния становится в случае рассмотрения сверхлокализованных состояний света, так как характерный масштаб дефектов и неоднородностей становится сравним с длиной волны поляритонной моды. В частности, активно изучаемые в наше время ван-дер-ваальсовы материалы, такие как гексагональный нитрид бора (hBN), поддерживают гиперболические фонон-поляритоны с огромным волновым вектором [10], а методы выращивания пленок таких материалов часто приводят к существенной шероховатости и значительному количеству дефектов, а значит, модификации дисперсионного соотношения электромагнитных мод, распространяющихся в пленках таких материалов. Однако известные способы вычисления поправок к волновому вектору и длине пробега поляритонов до сих пор не были применены к модам в ван-дер-ваальсовых материалах.

В данной работе мы теоретически и экспериментально изучаем процессы излучения, распространения и наблюдения фонон-поляритонов в тонких пленках hBN. Обобщая теорию, разработанную для вычисления поправок к дисперсии поверхностных плазмон-поляритонов за счет шероховатости металла [11], мы получили поправки к волновому вектору фонон-поляритонов:

$$k = \frac{-2\varepsilon}{\varepsilon'_0 d} + \frac{2i\varepsilon}{\varepsilon'_0 d} \frac{\varepsilon''_0}{\varepsilon'_0} - \frac{4\pi^3 i \varepsilon^3 \sigma^2}{\varepsilon'^3_0 d^3} \frac{\delta^2}{d^2}, \quad (1)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость среды, окружающей пленку, ε'_0 и ε''_0 – действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости пленки, d – ее толщина, δ – среднеквадратичная амплитуда шероховатостей, а σ – их корреляционная длина. На рис. 1 приведены зависимости длины волны и длины пробега фонон-поляритонов в зависимости от частоты для разных параметров шероховатости

Таким образом, в работе были вычислены поправки к дисперсионному соотношению фонон-поляритонов в тонких пленках гиперболических материалов с перпендикулярной пленки оптической осью, обусловленные наличием дефектов (шероховатости пленки) с заданной корреляционной длиной

и средним отклонением эффективной двумерной проводимости пленок от среднего. Также построена модель и выведены формулы, описывающие процесс измерения пленки с дефектами сканирующим ближнепольным микроскопом рассеивающего типа [12]. Произведено моделирование резонансов в полосках, вырезанных из рассматриваемого материала. Все теоретические результаты были проверены экспериментально на примере специально изготовленных пленок hBN.

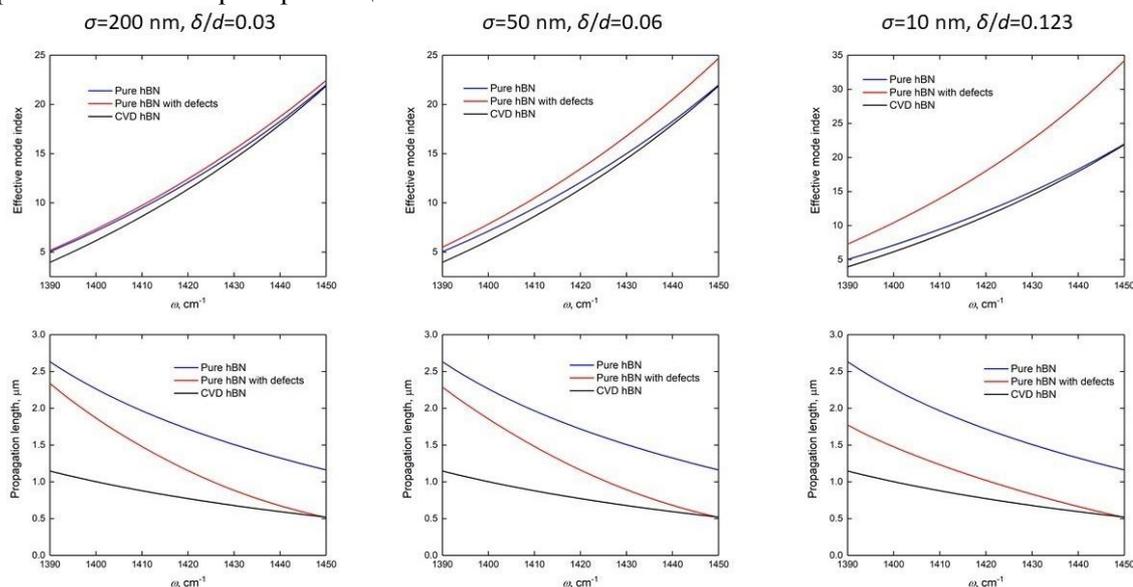


Рис. 1. Зависимость длины волны и длины пробега фонон-поляритонов от частоты для разных значений корреляционной длины и относительной среднеквадратичной шероховатости пленки hBN

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-606).

Литература

1. *Basov D.N., Asenjo-Garcia A., Schuck P. J., Zhu X., Rubio A.* Polariton panorama // *Nanophotonics*. 2021. V. 10. P. 549.
2. *Maier S.A.* Plasmonics: Fundamentals and Applications. Springer US: 2010. 224 с.
3. *Lezec H.J., Degiron A., Devaux E., Linke R.A., Martin-Moreno L., Garcia-Vidal F.J., Ebbesen T.W.* Beaming Light from a Subwavelength Aperture // *Science*. 2002. V. 297. P. 820.
4. *Ma W. et al.* In-plane anisotropic and ultra-low-loss polaritons in a natural van der Waals crystal // *Nature*. 2018. V. 562. P. 557.
5. *Sokolik A.A., Kotov O.V., Lozovik Y.E.* Plasmonic modes at inclined edges of anisotropic two-dimensional materials // *Phys. Rev. B*. 2021. V. 103. P. 155402.
6. *D'yakonov M.I.* New type of electromagnetic wave propagating at an interface // *Zh. EksP. Teor. Fiz.* 1988. V. 94. P. 119.
7. *Lu L., Joannopoulos J., Soljacic M.* Topological photonics // *Nature Photon.* 2014. V. 8. P. 821.
8. *Oh S.H. et al.* Nanophotonic biosensors harnessing van der Waals materials // *Nat. Commun.* 2021. V. 12. P. 3824.
9. *Liao W., Huang Y., Wang H., Zhang H.* Van der Waals heterostructures for optoelectronics: Progress and prospects // *Applied Materials Today*. 2019. V. 16. P. 435.
10. *Dai S., Fei Z., Ma Q., Rodin A.S., Wagner M.* Tunable Phonon Polaritons in Atomically Thin van der Waals Crystals of Boron Nitride // *Science*. 2014. V. 343. P. 1125.
11. *Maradudin A.A.* Interaction of Surface Polaritons and Plasmons with Surface Roughness // *Modern Problems in Condensed Matter Sciences*. 1982. V. 1. P. 405.
12. *Novotny L.* Principles of Nanooptics // Cambridge University Press 2006.

Детальный анализ спектров пропускания электромагнитного излучения среднего ИК-диапазона тонкими плёнками искусственного эумеланина

З.В. Бедрань¹, И.О. Тюренков¹, С.С. Жуков¹, П.А. Абрамов¹, А.Б. Мостерт², К.А. Мотовилов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Department of Chemistry, Swansea University

Среди обширного разнообразия природных пигментов одним из наиболее распространённых является эумеланин. Данное вещество выполняет множество функций у животных, например, пигментация кожных и волосных покровов позвоночных и других представителей фауны [1–3], защита от оптического и ионизирующего излучения [4, 5], хелатирование ионов металлов [6] и другие.

Ввиду широкой распространённости и богатства полезных свойств меланин активно применяется в настоящее время в ряде задач по созданию биосовместимых устройств, таких как протонные проводники [7, 8], съедобные элементы питания [9], суперконденсаторы [10] и органические электрохимические транзисторы [11].

Структурно эумеланин является сопряженным полимером, состоящим из мономеров 5,6-дигидроксииндола, 5,6-дигидроксииндола-2-карбоновой кислоты (рис. 1), их частично окисленных форм, представленных широким набором таутомеров.

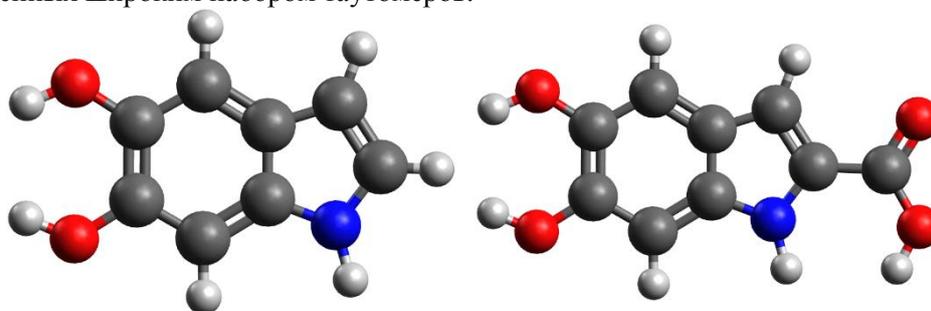


Рис. 1. Мономеры меланина. Слева 5,6-дигидроксииндол, справа – 5,6-дигидроксииндол-2-карбоновая кислота

Один из факторов, оказывающих наиболее сильное влияние на свойства эумеланина, является уровень гидратации. Действительно, в постоянном поле проводимость изменяется на 8 порядков при изменении массовой доли воды в материале от 0 до 21% [12]. Несмотря на то, что физико-химические особенности взаимодействия звеньев меланина с водой исследуются уже более 20 лет [3], научного консенсуса в этой области нет. Наиболее распространённое представление о характере данного процесса даётся в рамках механизма реакции сопропорционирования окисленной и восстановленной формы индол-хинона с образованием семихинона (рис. 2) [12].

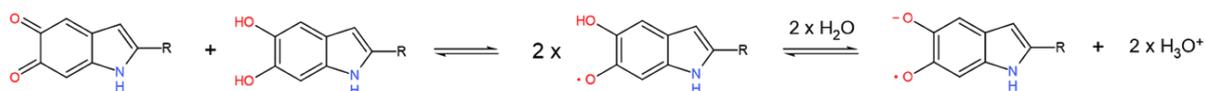


Рис. 2. Реакция сопропорционирования. Взаимодействие окисленной формы – хинона и восстановленной – гидрохинона приводит к образованию промежуточной формы окисления, семихинон-радикала. Гидратация приводит к депротонированию семихинона с образованием аниона семихинона (V или VII) и подвижных протонов, которые на схемах традиционно обозначаются катионами гидроксония H_3O^+

Однако последовательная генерация этой формы мономера при гидратации материала не была тщательно исследована независимыми методами. Кроме того, открытым является вопрос об организации сети водородных связей в зависимости от концентрации воды в эумеланине. Последнее имеет прямое отношение к эффективности осуществляемого в материале протонного транспорта.

Инфракрасная спектроскопия среднего диапазона (1000 см^{-1} – 8000 см^{-1}) является эффективным методом исследования конформаций воды, так как молекула H_2O имеет характерные внутримолекулярные частоты, лежащие в этой области (1640 см^{-1} , 3450 см^{-1} и 3615 см^{-1} в фазе жидкости). Кроме того, характерные возбуждения карбониллов наблюдаются в районе 1700 см^{-1} , а именно данное соединение испытывает наибольшие изменения при изменении баланса в реакции сопропорционирования.

Чувствительность ИК-спектров к конкретному виду химической связи делает данный подход перспективным в решении задачи исследования влияния влажности на меланин также ввиду перспективы зафиксировать изменения в формации О-Н, N-H и C-H одинарных и двойных связей, играющих важную роль как в микроскопическом упорядочении эумеланина, так и в макроскопических наблюдаемых параметрах.

В данной работе исследовались образцы искусственного эумеланина, приготовленные в виде тонких плёнок на подложках из CaF₂ с помощью метода аэрозольного напыления аммиачного раствора меланина. Характеризация образцов проводилась на инфракрасном фурье-спектрометре Bruker v80 с помощью микроскопа Nupreion 2000. В процессе эксперимента были измерены спектры пропускания электромагнитного излучения в среднем ИК-диапазоне в 6 точках исследуемого образца. Полученные спектры были декомпозированы в подходящий набор гауссовых и лорентцевых спектральных линий. По характеру зависимости параметров полученных мод от влажности были сделаны выводы о химических процессах, протекающих в эумеланине под действием влажности, а также было найдено первое прямое подтверждение образования семихинона в ходе реакции сопропорционирования.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-73-10154). А.Б. Мостерт является участником программы Sêr Cymgu II и результаты доклада включаются в его работу, поддерживаемую правительством Уэльса в рамках исследовательской и инновационной программы Европейского Союза Horizon 2020 в рамках грантового соглашения Марии Складовской-Кюри № 663830.

Литература

1. *D'Alba L. and Shawkey M.D.*, «Melanosomes: Biogenesis, Properties, and Evolution of an Ancient Organelle // *Physiol. Rev.*, V. 99, N 1, P. 1–19, Sep. 2018
2. *Borovansky J.*, *Melanins and Melanosomes: Biosynthesis, Biogenesis, Physiological, and Pathological Functions.* John Wiley & Sons, Ltd, 2011, P. 1–19. doi: 10.1002/9783527636150.ch1.
3. *Prota G.*, *Melanins and Melanogenesis.* San Diego, CA: Academic Press, 1992.
4. *Meredith P. and Riesz J.* Radiative Relaxation Quantum Yields for Synthetic Eumelanin // *Photochem. Photobiol.*, V. 79, N 2, P. 211–216, 2004.
5. *Dadachova E. et al.* «Ionizing Radiation Changes the Electronic Properties of Melanin and Enhances the Growth of Melanized Fungi // *PLOS ONE*, V. 2, N 5, P. e457, May 2007.
6. *Felix C.C., Hyde J.S., Sarna T., and Sealy R.C.*, «Interactions of melanin with metal ions. Electron spin resonance evidence for chelate complexes of metal ions with free radicals // *J. Am. Chem. Soc.*, V. 100, N 12, P. 3922–3926, Jun. 1978.
7. *Mostert A.B., Powell B.J., Gentle I.R., Meredith P.* On the origin of electrical conductivity in the bio-electronic material melanin // *Applied Physics Letters*, 2012, T. 100, N 9, C. 093701.
8. *Baraldi P., Capelletti R., Crippa P. R., Romeo N.* Electrical Characteristics and Electret Behavior of Melanin // *Journal of The Electrochemical Society*, 1979, V. 126, N 7, P. 1207.
9. *Kim Y.J., Wu W., Chun S.-E., Whitacre J.F., Bettinger C.J.* Biologically derived melanin electrodes in aqueous sodium-ion energy storage devices // *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2013, V. 110, N 52, P. 20912–20917.
10. *Kumar P., Mauro E.D., Zhang S., Pezzella A., Soavi F., Santato C., Cicoira F.* Melanin-based flexible supercapacitors // *Journal of Materials Chemistry C*, 2016, V. 4, N 40, P. 9516–9525.
11. *Sheliakina M., Mostert A.B., Meredith P.* An all-solid-state biocompatible ion-to-electron transducer for bioelectronics // *Materials Horizons*, 2018, V. 5, N 2, P. 256–263.
12. *Motovilov K.A., Grinenko V., Savinov M., Gagkaeva Z.V., Kadyrov L.S., Pronin A.A., Bedran Z.V., Zhukova E.S., Mostert A.B., Gorshunov B.P.* Redox chemistry in the pigment eumelanin as a function of temperature using broadband dielectric spectroscopy // *RSC Advances*, 2019, T. 9, N 7, C. 3857–3867.

УДК 535.015

Расчет оптических свойств муаровых метаповерхностей при помощи фурье модального метода

Н.С. Салахова², И.М. Фрадкин^{1,2}, С.А. Дьяков², Н.А. Гиппиус²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Сколковский институт науки и технологий

Несколько лет назад в физике твердого тела произошел настоящий прорыв, когда было продемонстрировано существенное изменение электронных свойств в двуслойных системах двумерных ма-

териалов благодаря появлению муаровой сверхрешетки, при наложении двух повернутых решеток атомов. Успех данного подхода привлек дополнительное внимание к муаровым решеткам и в области физики фотонных структур. Однако этот вопрос изучен слабо, и в литературе рассмотрено лишь несколько частных примеров [1–4]. Одной из возможных причин является сложность проведения численных расчётов для муаровых решеток в связи со значительным ростом величины элементарной ячейки составной структуры при повороте решеток относительно друг друга. Большой размер элементарной ячейки требует значительно больших вычислительных мощностей и существенно увеличивает необходимое для расчетов время.

Авторами разработана модификация фурье модального метода (ФММ) для проведения расчетов оптических свойств системы одномерных фотонных кристаллов с муаровым узором (рис. 1а) [5]. В основе метода используется тот факт, что каждая подсистема содержит лишь одномерную периодичность и, как следствие, значительно проще для рассмотрения, чем итоговая. Свойства рассматриваемой системы одномерных фотонных кристаллов и используемого как основа ФММ таковы, что построение решения задачи из результатов многократных расчетов простых одномерных задач рассеяния существенно быстрее, чем однократное решение исходной двумерной задачи. Кроме того, наличие небольшой диэлектрической престоички между периодическими слоями позволяет отфильтровывать сильно затухающие фурье-гармоники высоких порядков. Причем уровень фильтрации, определяемый уравнением (1), может существенно влиять на скорость расчетов без видимых потерь точности (рис. 1б).

$$\Theta < \exp\left(-\operatorname{Im}\sqrt{\frac{\epsilon_{gl}\omega^2}{c^2} - (\mathbf{k}_{\parallel} + n\mathbf{G}^1 + m\mathbf{G}^2)^2 H}\right) \quad (1)$$

Разработанный метод значительно ускоряет расчёты, давая выигрыш во времени в сравнении со стандартным ФММ порядка 10 раз для метода без фильтрации высших гармоник и до 1000 раз с учетом фильтрации (рис. 1б (снизу)). Кроме того, точность разработанного метода сравнима с точностью стандартного ФММ, как видно из расчетов поглощения x -поляризованного света в системе повернутых одномерных золотых решеток (рис. 1б (справа)).

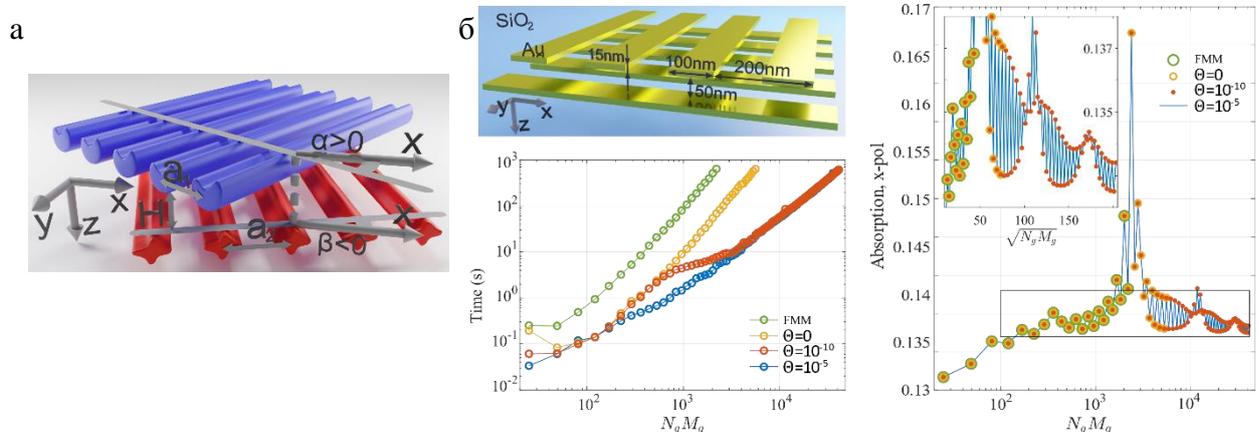


Рис. 1 (а) Схема структуры из произвольных одномерных фотонных кристаллов, повернутых относительно друг друга на некоторый угол. (б) Система двух одинаковых одномерных золотых решеток, повернутых на 90° . Сравнение времен расчета (рисунок снизу) и результатов расчета коэффициента поглощения (рисунок справа) стандартного и адаптированного ФММ. Различные цвета, соответствующие адаптированному ФММ, соответствуют различному уровню фильтрации затухающих гармоник в однородном слое (см. ур. (1))

При помощи данного подхода удалось продемонстрировать ряд интересных физических эффектов, таких как наличие высокочастотных перестраиваемых резонансов в спектре диэлектрических муаровых решеток, изменение дисперсии плазмонной моды в структуре из золотых решеток – от гиперболической до замкнутой, а также возможность использования алмазного фотонного кристалла в качестве источника циркулярно-поляризованного теплового излучения и для маршрутизации излучения циркулярно-поляризованного дипольного источника.

Данная работа предоставляет надежный базис для проведения дальнейших исследований в области фотоники муаровых структур.

Литература

1. *Hu G., Krasnok A., Mazor Y., Qiu C.W., and Alù A.*, «Moiré Hyperbolic Metasurfaces // *Nano Lett.*, V. 20, N 5, P. 3217–3224, 2020.
2. *Chen M. et al.* Configurable phonon polaritons in twisted α -MoO₃ // *Nat. Mater.*, 2020.
3. *Aftenieva O., Schnepf M., Mehlhorn B., and König T.A.F.* Tunable Circular Dichroism by Photoluminescent Moiré Gratings // N December, 2020.
4. *Wu Z. and Zheng Y.*, Moiré Metamaterials and Metasurfaces // *Adv. Opt. Mater.*, V. 6, N 3, P. 1–14, 2018.
5. *Salakhova N.S., Fradkin I.M., Dyakov S.A., and Gippius N.A.* Fourier modal method for moiré lattices // *Phys. Rev. B*, V. 104, N 8, P. 1–14, 2021.

УДК 538.958

Одномерные ван-дер-ваальсовы гетероструктуры: новый перспективный материал для оптоэлектроники

М.Г. Бурданова

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Терагерцовая спектроскопия – это уникальный бесконтактный и неразрушающий метод измерения проводимости наноматериалов. В этом докладе мы представим текущее состояние экспериментальных исследований ТГц-свойств квазиодномерных (1D) материалов, таких как нанотрубок (НТ) и 1D ван-дер-ваальсовых гетероструктур на их основе (рис. 1а) [1]. В таких наноматериалах оптоэлектронные свойства претерпевают резкие изменения в результате дополнительной кривизны и квантового ограничения в сравнении с двумерными (2D) наноматериалами, что сказывается на их применении в различных устройствах [2].

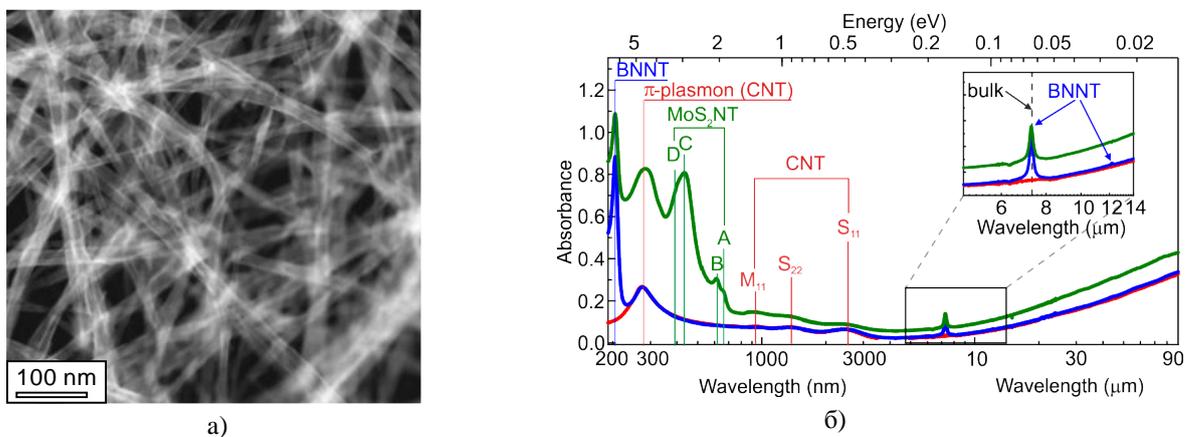


Рис. 1. а) ПЭМ микрофотография изучаемых образцов пленки 1D Ван-дер-Ваальсовых гетероструктур. б) Спектры поглощения пленок 1D Ван-дер-Ваальсовых гетероструктур с характерными экситонными пиками УНТ – S₁₁, S₂₂, M₁₁, и MoS₂НТ – А, В, С

Взаимодействия элементарных частиц в НТ и 1D ван-дер-ваальсовых гетероструктурах сильно усиливаются в сравнении с объемными полупроводниками из-за уменьшения размерности и, следовательно, уменьшения диэлектрического экранирования. Эти усиленные взаимодействия многих тел приводят к образованию устойчивых квазичастиц, таких как экситоны, трионы и биэкситоны, что чрезвычайно важно для различных приложений оптоэлектроники [2, 3]. Равновесная и неравновесная ТГц-спектроскопия в сочетании с неравновесной спектроскопией поглощения являются идеальными инструментами для исследования различных квазичастиц, таких как электроны, фононы, экситоны, трионы, и подходят для количественного измерения их сверхбыстрой динамики.

В данной работе будет показано, что легирование углеродных нанотрубок (УНТ) позволило подавить поглощения, вызванные экситонными переходами, и одновременно с увеличением ТГц-проводимости. При оптическом возбуждении фемтосекундным лазером образцы показали фотоиндуцированное обесцвечивание ТГц-проводимости и отчетливо различную временную динамику рекомбинации. Такую редко-наблюдаемую отрицательную фотопроводимость можно объяснить образованием

трионов [3]. Кроме того, сверхбыстрая неравновесная спектроскопия в видимом и ТГц-диапазонах частот позволили определить, что в MoS₂ НТ в одномерных ван-дер-Ваальсовых гетероструктурах экситоны и свободные носители заряда сосуществуют одновременно [4]. Кроме того, оптические свойства 1D Ван-дер-Ваальсовых гетероструктур не являются простой комбинацией свойств отдельных компонентов, а представляют собой уникальные связанные свойства структуры как единого целого (рис. 1б) [5].

Таким образом, в докладе будет показано, что ввиду одномерности Ван-дер-Ваальсовых гетероструктур, они обладают уникальными свойствами отличными от объемных материалов. Дальнейшее развитие данной темы позволит улучшить понимание динамики переноса фотовозбужденных носителей заряда и квазичастиц, что важно для будущих устройств наноэлектроники и устройств ТГц-диапазона на основе УНТ и их гетероструктур.

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФ № 21-79-10097.

Литература

1. *Burdanova M.G., Tsapenko A.P., Kharlamova M.V., Kauppinen E.I., Gorshunov B.P., Kono J., Lloyd-Hughes J.*, A Review of the Terahertz Conductivity and Photoconductivity of Carbon Nanotubes and Heteronanotubes, *Advanced Optical Materials*, 2021, 210104.
2. *Burdanova M.G., Katyba G.M., Kashtiban R., Komandin G.A., Butler-Caddle E., Staniforth M., Mkrtychyan A.A., Krasnikov D.V., Gladush Y.G., Sloan J, Nasibulin A.G., Lloyd-Hughes J.*, Ultrafast, high modulation depth terahertz modulators based on carbon nanotube thin films, *Carbon*, 2021, 245–252.
3. *Burdanova M.G., Tsapenko A.P., Satco D.A., Kashtiban R, Mosley C.D.W, Monti M., Staniforth M., Sloan J., Gladush Y.G., Nasibulin A.G., Lloyd-Hughes J.*, Giant Negative Terahertz Photoconductivity in Controllably Doped Carbon Nanotube Networks, *ACS Photonics*, 2019, 1058–1066.
4. *Burdanova M.G., Kashtiban R.G., Zheng Y., Xiang R., Chiashi Sh., Woolley J.M., Staniforth M., Sakamoto-Rablah E., Xie X., Broome M., Sloan J., Anisimov A., Kauppinen E.I., Maruyama Sh., Lloyd-Hughes J.*, Ultrafast Optoelectronic Processes in 1D Radial van der Waals Heterostructures: Carbon, Boron Nitride, and MoS₂ Nanotubes with Coexisting Excitons and Highly Mobile Charges, *Nano Letters*, 2020, 3560–3567.
5. *Burdanova M.G., Liu M., Staniforth M., Zheng Y., Xiang R., Chiashi S., Anisimov A., Kauppinen E.I., Maruyama, S., Lloyd-Hughes, J.*, Intertube Excitonic Coupling in Nanotube Van der Waals Heterostructures, *Advanced Functional Materials*, 2021, 2104969.

УДК 538.971

Ионно-лучевой метод создания серебряных наноструктур для сенсорных приложений

*Н.В. Дорошина¹, О.А. Стрелецкий², В.В. Сычев³, Д.И. Якубовский¹,
М.С. Миронов¹, А.А. Воронов¹, А.В. Арсенин¹, В.В. Волков¹, С.М. Новиков¹*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Московский государственный университет

³Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

В работе представлены результаты исследования плазмонных свойств ансамблей наночастиц серебра ~ 45 нм, сформированных из серебряной пленки с использованием ионно-лучевой модификации. Оптическая спектроскопия показала, что полученные ансамбли наночастиц серебра сохраняют стабильные плазмонные свойства не менее 39 дней и обладают высоким коэффициентом усиления, который сохраняется в течении более чем одного месяца хранения в окружающей атмосфере. Таким образом, исследуемый метод позволяет получать наночастицы со стабильными плазмонными свойствами и создавать наноструктуры для сенсорных приложений, включая ГКР-активные поверхности.

Наночастицы (НЧ) серебра демонстрируют превосходные плазмонные свойства и имеют большие перспективы для сенсорных приложений, в то время как быстрое окисление и сульфидирование серебра в окружающей атмосфере вызывает множество трудностей для его практического применения [1]. Ранее было показано, что НЧ серебра, сформированные методом кластерного осаждения, демонстрируют высокую стабильность плазмонных свойств и высокую стойкость к окислению благодаря своей монокристаллической структуре [2–3]. Мы приготовили НЧ серебра с помощью комбинации двойной системы магнетронного распыления и метода ионно-лучевой модификации; полученные наноструктуры показали стабильность плазмонных свойств. Оптические спектры образцов с ансамблями НЧ серебра, хранившегося в атмосфере, представлены на рис. 1.

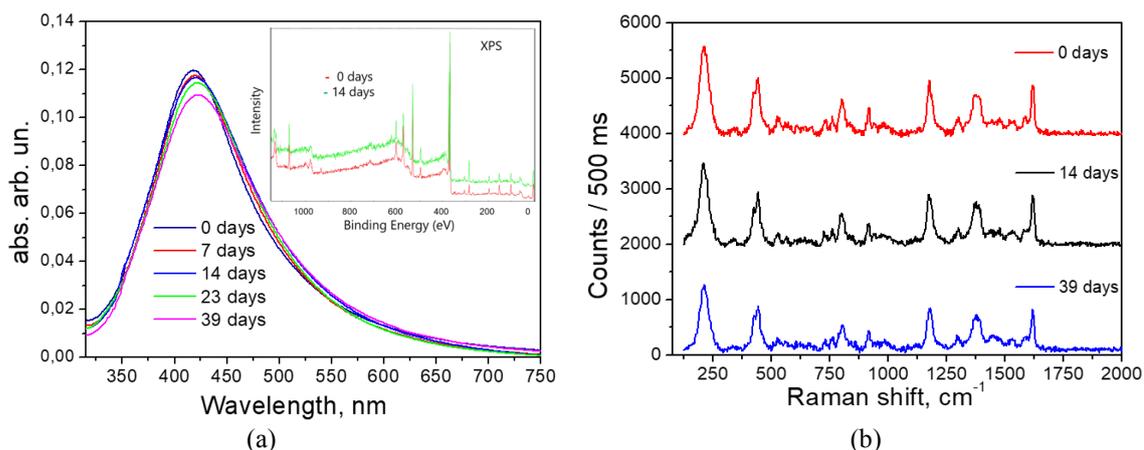


Рис. 1. (а) Эволюция спектров поглощения образца с НЧ Ag в зависимости от времени. Вставка демонстрирует XPS-спектры, полученные от образца в день изготовления НЧ и через 14 дней (б) ГКР-спектры CV с концентрацией 10^{-6} М, адсорбированные на ансамблях НЧ серебра и полученные через 0, 14 и 39 дней после изготовления наночастиц

Интенсивность и спектральное положение плазмонного резонанса изготовленных наночастиц, регистрировали в течение 39 дней (рис. 1а). Через 7 дней наблюдалось небольшое смещение положения резонанса в красную область при незначительном снижении интенсивности. В период от 7 до 23 дней интенсивность продолжала монотонно снижаться. Через 39 дней интенсивность резонанса снизилась до менее чем на 10% от исходной интенсивности, что демонстрирует стабильность оптических свойств. Было известно, что интенсивность ГКР-сигнала многократно уменьшается при окислении серебра [4], поэтому ГКР можно использовать как маркер стабильности изготовленных частиц. Образцы были покрыты 10^{-6} М водным раствором красителя Crystal Violet (CV) и высушены в условиях окружающей среды. Типичные спектры ГКР, полученные для образцов с ансамблями НЧ серебра (0, 14 и 39 дней после изготовления), представлены на рис. 2б. Спектры демонстрируют относительно одинаковую интенсивность для образцов, которые находились в окружающей атмосфере в течение 0 и 14 дней. Интенсивность ГКР-сигнала, полученная для образцов через 39 дней после изготовления, незначительно уменьшилась (~ 10 –15%) демонстрируя тем высокую стабильность. Таким образом, мы продемонстрировали метод изготовления наночастиц серебра, обладающих высокой стабильностью плазмонных свойств и позволяющий использовать такие наночастицы, например в ГКР-сенсорах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (20-07-00475, 18-29-02089 и 20-07-00840).

Литература

1. W. Cao, H. E. Elsayed-Ali, *Mater. Lett.* 63, 2263 (2009).
2. S. M. Novikov, V. N. Popok, A. B. Evlyukhin, M. Hanif, P. Morgen, J. Fiutowski, J. Beermann, H.-G. Rubahn, S. I. Bozhevolnyi, *Langmuir* 33 6062–6070 (2017).
3. H. Hartmann, V. N. Popok, I. Barke I, V. von Oeynhausen and K.-H. Meiwes-Broer, *Rev. Sci. Instrum.* 83, 073304 (2012).
4. Han Y, Lupitsky R, Chou TM, Stafford CM, Du H, Sukhishvili S. *Anal. Chem.*, 83 (15), pp 5873–5880, (2011).

Понижение порога оптического переключения суб-ТГц/ТГц-свойств метаповерхностей из VO₂ и Au

А.С. Славич¹, И.К. Домарацкий¹, С.С. Жуков¹, Р.В. Куртаев¹,
Д.А. Мыльников¹, М.Е. Кутенов², Е.М. Кайдашев² и В.Е. Кайдашев¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Южный федеральный университет, Стачки 200/1., 344090 Ростов-на-Дону, Россия

Излучение в терагерцовом диапазоне частот привлекает внимание учёных из-за его потенциала в биомедицине и высокоскоростных беспроводных телекоммуникационных технологиях, что обуславливает спрос на умные и многофункциональные устройства для фильтрации и фокусировки терагерцового излучения. В качестве инструмента для разработки таких устройств широко рассматриваются метаповерхности на основе массивов упорядоченных металлических структур [1]. Определяя очерёдность и геометрию отдельных элементов метаповерхности, можно устанавливать её суб-ТГц/ТГц-свойства [2]. Метаповерхности на основе VO₂ обладают повышенной функциональностью, поскольку проводимость данного материала повышается более чем на 4 порядка в результате низкотемпературного фазового перехода [3]. Регулируя проводимость всего массива или его отдельных элементов путём термического нагрева, воздействия фокусированным пучком электромагнитного излучения или пропускания электрического тока, можно обратимо переключать свойства всей метаповерхности [4–5].

В данном докладе рассматриваются методы оптимизации переключения терагерцовых свойств метаповерхностей на основе оксида ванадия. В рамках данного исследования нами были изготовлены метаповерхности для суб-ТГц- и ТГц-диапазона частот на основе массива золотых микроантенн на поверхности пленки VO₂ и изучены различные способы их переключения. По результатам работы удалось существенно снизить пороговую мощность оптического переключения метаповерхностей лазерным излучением УФ- и ближнего ИК-диапазона. С помощью рассматриваемой методики становится возможным переключение отдельных участков метаповерхности электромагнитным излучением малой интенсивности, что может существенно расширить спектр её рабочих состояний. Предлагаемый подход позволяет преодолеть существующие ограничения в разработке динамически программируемых ТГц-устройств на основе метаповерхностей.

Изготовление эпитаксиальных пленок VO₂ выполнено при поддержке гранта Южного Федерального университета № 07/2020-06-ММ.

Изготовление метаповерхностей проводилось на оборудовании ЦКП МФТИ при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования РФ № RFMEFI59417X0014 и гранта РНФ № 16-19-10557. Изучение свойств метаповерхностей проводилось при финансовой поддержке проекта РФФИ № 18-02-00151А.

Литература

1. Dong R. *et al.* Plasmonic resonance of bowtie antennas and their geometry dependence // Proc. SPIE 2012. V 8562.
2. Cui T. *et al.* Coding metamaterials, digital metamaterials and programmable metamaterials // Light Sci. Appl. 2014. V 3.
3. Wen H. *et al.* Structural and electronic recovery pathways of a photoexcited ultrathin VO₂ film // Phys. Rev. B. 2013. V 88. P. 165424.
4. Liu X. *et al.* Thermally dependent dynamic meta-holography using a vanadium dioxide integrated metasurface // Adv. Opt. Mater. 2019. V. 7. P. 1900175.
5. Shabanpour J. *et al.* Ultrafast reprogrammable multifunctional vanadium-dioxide assisted metasurface for dynamic THz wavefront engineering // Scientific Reports 2020. V 10. P. 8950.

Температурные зависимости спектров комбинационного рассеяния света для дисульфида титана

С.М. Раджам, П. Мишра, А.В. Арсенин, В.С. Волков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В докладе будут представлены результаты экспериментального исследования температурной зависимости спектров комбинационного рассеяния дисульфида титана, отражающих колебательные свойства материала, обусловленные электрон-фононным взаимодействием. Режимы рамановского рассеяния претерпевают линейное красное смещение в сторону более высоких температур из-за теплового расширения решетки и фононных ангармонических эффектов, вызванных вызванным температурой нарушением межатомных сил и положений атомного равновесия (рис. 1).

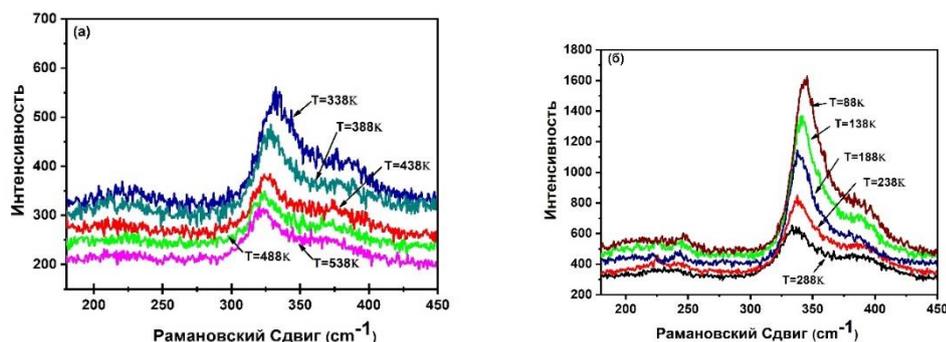


Рис. 1. (а) Спектры комбинационного рассеяния света, наблюдаемые для диапазона температур от 338 до 538 К, показывают линейное красное смещение с увеличением температуры, (б) Спектры комбинационного рассеяния света для диапазона температур от 88 до 288 К показывают аналогичное линейное красное смещение с увеличением температуры

В этом исследовании также изучается влияние лазерного излучения на спектры комбинационного рассеяния для свободно подвешенного образца дисульфида титана. Представленные зависимости оптических свойств от температуры имеют важное значение для проектирования оптоэлектронных устройств для работы в экстремальных температурных условиях [1, 2].

Литература

1. Wang, Q., Kalantar-Zadeh, K., Kis, A. et al. Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides. *Nature Nanotech* **7**, 699–712 (2012). <https://doi.org/10.1038/nnano.2012.193>.
2. Y. Ge, Z. Zhu, D. Fan et al. Broadband nonlinear photoresponse of 2D TiS₂ for ultrashort pulse generation and all-optical thresholding devices, *Adv. Opt. Mater.*, **6** (2017), P. 1701166.

Анализ свойств меланина в радиочастотном диапазоне методом DRT

П.А. Абрамов¹, С.С. Жуков¹, З.В. Бедрань¹, Б.П. Горишунов¹, А.Б. Мостерт², К.А. Мотовилов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Химический факультет Университета Суонси, Уэльс, Великобритания

С каждым годом вопрос утилизации отходов полупроводниковой промышленности становится все более острым. Согласно прогнозу ^{1(р6341)}, в этом году мировая экономика произведет 52,2 миллиона тонн электронных отходов, опасных для окружающей среды. Меланины являются одним из перспективных семейств биоразлагаемых материалов, способных частично заменить обычные полупроводники, используемые в устройствах с низким энергопотреблением [2, 3]. Несмотря на активные исследования, проводимые в течение более чем последних 70 лет, их структурные свойства и механизмы транспорта остаются спорными для научного сообщества. На основе меланина уже построены органи-

ческие транзисторы [4, 5], но их свойства значительно уступают аналогам. Целью настоящего исследования было изучение механизмов проводимости меланина в радиочастотном (РЧ) диапазоне, а также изменения его свойств в зависимости от степени гидратации.

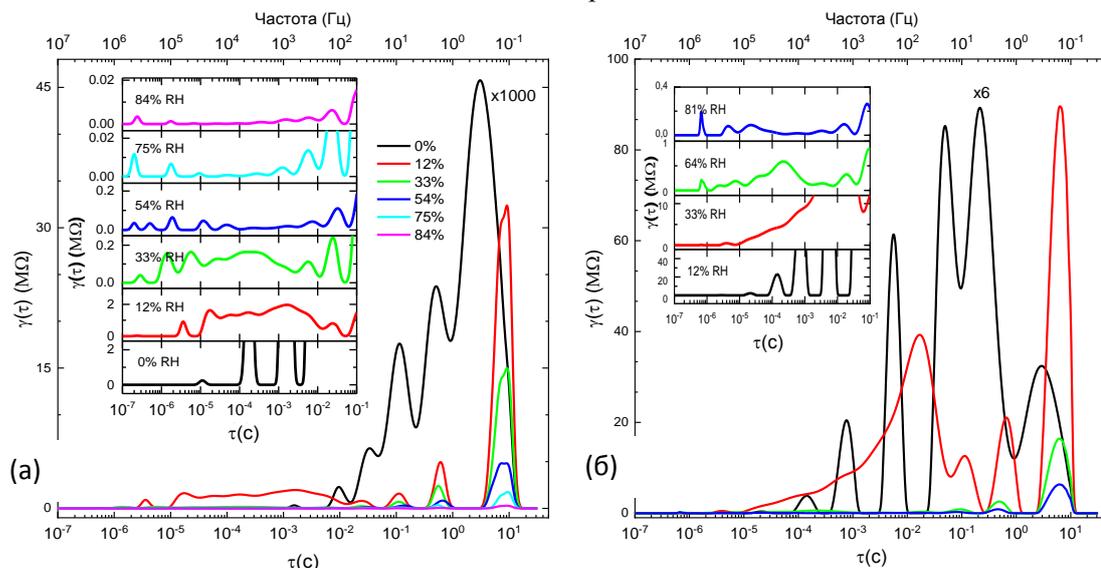


Рис. 1. Распределение времен релаксаций для (а): чистого меланина при 0%, 12%, 33%, 54%, 75% and 84% RH (относительная влажность). График 0% RH был для удобства уменьшен по амплитуде в 10^3 раз. На вставке изображена область для времен релаксаций менее 0.1 с; (б): медированного меланина при 12%, 33%, 64% and 81% RH. График 12% RH был для удобства уменьшен по амплитуде в 6 раз. На вставке изображена область для времен релаксаций менее 0.1 с

В работе были использованы синтезированные ранее 2 вида синтетического меланина⁵: чистый DOPA-эумеланин и легированный ионами Cu^{2+} . Содержание меди в легированном образце было оценено в 40 491 мкг/г по результатам элементного анализа GC-MS. Порошок меланина прессовался в плоскопараллельные таблетки диаметром 5 мм и толщиной 700 мкм под давлением 800 МПа. На образцы напылялись золотые электроды. Исследования диэлектрических свойств были произведены по 4-контактной схеме импеданс-анализатором MFIA Zurich Instruments в диапазоне 0.1 Гц – 5 МГц при постоянной температуре. Относительная влажность регулировалась путем выдерживания образцов в атмосфере паров воды над насыщенными растворами солей.

Анализ полученных результатов был произведен в терминах распределения времен релаксаций (DRT) [6] и эквивалентных схем. Было обнаружено, что проводимость чистого меланина по меньшей мере в 30 раз больше, чем у меланина, легированного ионами меди на частотах меньше 1 кГц. Мы показали, что присутствие ионов Cu^{2+} приводит к отставанию в эволюции импеданса с ростом влажности по сравнению с недопированным меланином. По нашему мнению, это связано с комплексообразующими свойствами ионов меди, которые могут эффективно связывать в своей координационной сфере как молекулы воды, так и нуклеофильные группы мономеров меланина, в том числе анионы семихинона, синтезирующиеся в ходе реакции сопропорционирования [5]. Этот эффект является предметом дальнейших исследований. Проведенный DRT анализ демонстрирует отсутствие существенной разницы во времени релаксации в исследуемых материалах при высоких влажностях (рис. 1). Однако при низких влажностях 12% для легированного меланина и 0% для чистого 3 релаксационных пика исчезают.

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФ № 19-73-10154. Работа А.Б. Мостерта была поддержана в рамках программы Sêr Cymru II и результаты доклада включаются в его работу, поддерживаемую правительством Уэльса в рамках исследовательской и инновационной программы Европейского Союза Horizon 2020 в порядке грантового соглашения Марии Склодовской-Кюри № 663830.

Литература

1. <http://collections.unu.edu/view/unu:6341>
2. Mostert A.B. *Melanin, the What, the Why and the How: An Introductory Review for Materials Scientists Interested in Flexible and Versatile Polymers* // *Polymers*. 2021;13(10):1670. doi:10.3390/polym13101670.
3. d'Ischia M., Wakamatsu K., Cicoira F., et al. *Melanins and melanogenesis: from pigment cells to human health and technological applications* // *Pigment Cell Melanoma Res.* 2015;28(5):520–544. doi:10.1111/pcmr.12393.

4. *Sheliakina M., Mostert A.B., Meredith P.* An all-solid-state biocompatible ion-to-electron transducer for bioelectronics // *Mater Horiz.* 2018;5(2):256–263. doi:10.1039/C7MH00831G.
5. *Mostert A.B., Rienecker S.B., Sheliakina M., et al.* Engineering proton conductivity in melanin using metal doping // *J. Mater Chem B.* Published online August 5, 2020. doi:10.1039/D0TB01390K.
6. *Wan T.H., Saccoccio M., Chen C., Ciucci F.* Influence of the Discretization Methods on the Distribution of Relaxation Times Deconvolution: Implementing Radial Basis Functions with DRTtools // *Electrochimica Acta.* 2015; 184:483-499. doi: 10.1016/j.electacta.2015.09.097.

УДК 535.215.4

Сильная поляризационная чувствительность в металл-графен-металлических ИК-детекторах

В.А. Сёмкин, Д.А. Мыльников, Е.И. Титова, Д.А. Свинцов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Использование графена в качестве основы для проектирования фотодетекторов очень привлекательно и перспективно. Этот материал позволяет получать широкополосные [1–4] и в то же время быстрые [1, 3] детекторы от видимого до терагерцового излучения. Один из диапазонов, который нуждается в новых приёмниках с такими возможностями, – дальний инфракрасный. А отсутствие запрещенной зоны в графене обеспечивает поглощение излучения в этом диапазоне. Кроме того, отсутствие запрещенной зоны позволяет легко легировать графен носителями заряда при контакте с металлом. Это делает возможным изготовление простых фотоприемников на основе р-п переходов, естественным образом возникающих при изготовлении контактов к графену. Эффективное использование такого «контактного легирования» возможно, только если металлические контакты истока и стока индуцируют в графене носители заряда противоположного знака, так что в канале образуется р-(i)-п-переход. В противном случае фотоэлектрические напряжения, генерируемые на графен-металлических интерфейсах истока и стока, компенсировали бы друг друга при равномерном освещении. Необходимость в неодинаковом легировании сохраняется для всех известных механизмов детектирования: фотоэлектрического, термоэлектрического или плазмонного выпрямления [5, 6]. Оптимальный выбор металлических контактных пар, обеспечивающих такое разнородное легирование, до сих пор не исследовался.

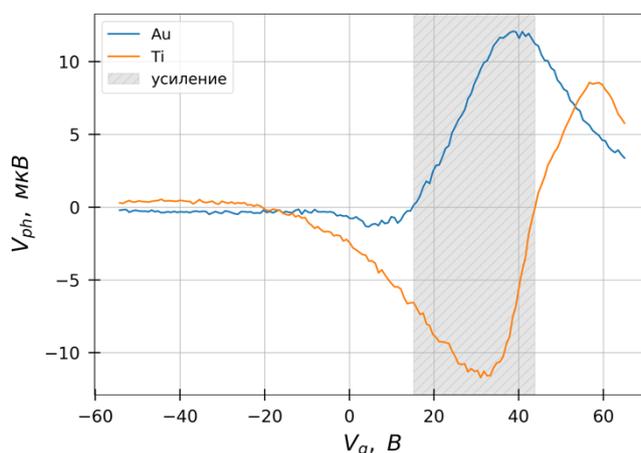


Рис. 3. Фотонапряжение на интерфейсе металл-графен для Ti (оранжевый) и Au (синий) в зависимости от управляемой нижним затвором концентрации носителей в графене. Серая область выделяет диапазон затворных напряжений, в котором общий сигнал с устройства усиливается за счёт суммирования сигналов с противоположных контактов

В данной работе были изготовлены детекторы с Au-Cr, Au-Ti и Ti-Cr контактами для выбора пары металлов, которая обеспечивает суммирование фотоэлектрических напряжений от разных контактов. Фотоэлектрическое напряжение измерялось путем освещения границы графен-металл сфокусированным лазерным лучом с длиной волны 8,6 мкм. Размеры устройства, значительно превышающие размер сфокусированного лазерного пятна, позволили изучить каждый контакт независимо от второго. Были получены зависимости фотоэлектрического напряжения, возникающего на границе раздела графен-металл, от плотности носителей (регулируемой нижним затвором). Самый широкий диапазон

напряжений затвора, в котором отдельные сигналы имеют одинаковый знак, был обнаружен в Au-Ti-устройстве (рис. 1). Усиление контактов друг с другом наблюдалось в 30 В диапазоне напряжений затвора, что соответствует диапазону концентраций носителей в $2,2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ для толщины подзатворного диэлектрика из диоксида кремния в 300 нм.

Затем была измерена поляризационная чувствительность устройства с Au-Ti-контактами. Для каждого контакта была проведена серия измерений зависимости фотонапряжения от затвора при различных углах поляризации излучения. Результаты измерений показаны на рис. 2. Различные цвета в серии представляют различные углы поляризации падающего излучения. Угол в ноль градусов соответствует электрическому полю, параллельному краю контакта, а 90 градусов – перпендикулярному. Мы обнаружили сильную поляризационную чувствительность устройства как на золотом, так и на титановом контактах. Оба контакта наиболее чувствительны в случае излучения, поляризованного перпендикулярно краю. Максимальное фотоэлектрическое напряжение в этом случае на порядок выше, чем в случае с излучением, поляризованным параллельно краю. Кроме того, максимумы отклика для интерфейсов графена с золотом и титаном расположены по разные стороны от ТЭН. Примечательно, что вблизи ТЭН существуют диапазоны концентрации носителей, в которых знак сигнала меняется с изменением угла поляризации. Этот факт указывает на то, что в этом диапазоне присутствуют по крайней мере два противоположных механизма детектирования с разной поляризационной чувствительностью. Кроме того, в данных присутствуют «фиксированные» точки, в которых фотонапряжение не зависит от поляризации излучения. Этот факт указывает на наличие также и независимого от поляризации механизма детектирования. Сильная поляризационная чувствительность нашего устройства может возникать в результате доминирования одного из механизмов на удалении от ТЭН. Поскольку этот механизм чувствителен к перпендикулярно поляризованному излучению, это может указывать на то, что это плазмонное выпрямление либо фотовольтаический эффект. Кроме того, такое поведение может быть вызвано эффектом усиления электрического поля кромками металлических контактов [7].

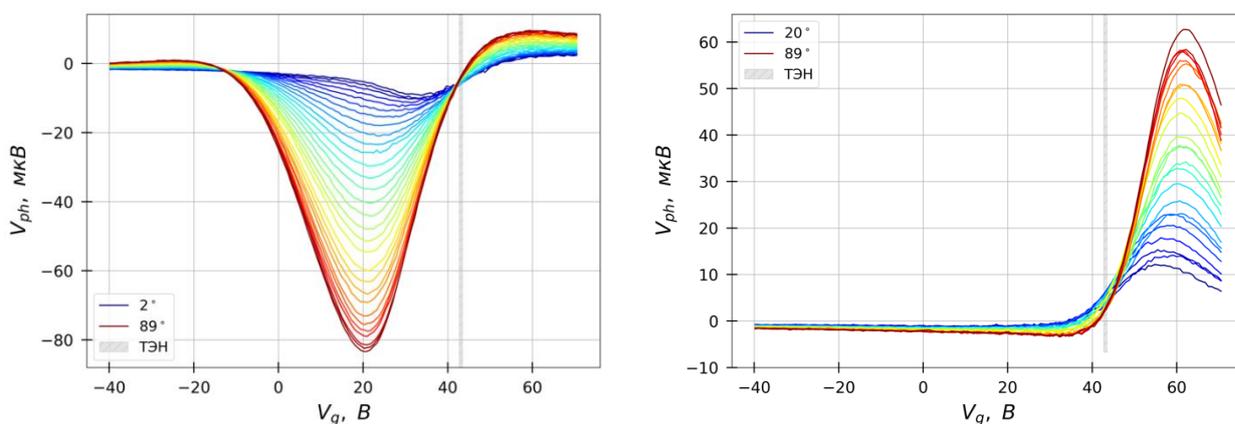


Рис. 2. Поляризационная чувствительность фотонапряжения на интерфейсе металл-графен для Ti (слева) и Au (справа) в зависимости от управляемой нижним затвором концентрации носителей в графене. 0° – электрическое поле параллельно контакту, 90° – перпендикулярно контакту

В работе показано, что металл-графен-металлические детекторы с разнородными контактами из золота и титана обеспечивают фотонапряжения одного и того же знака на контактах истока и стока в широком диапазоне концентраций носителей. Такая контактная пара предпочтительна для инфракрасного детектирования с нулевым смещением. Данные с поляризационными измерениями указывают на наличие по меньшей мере двух поляризационно-зависимых механизмов детектирования и одного поляризационно-независимого механизма. Сильная поляризационная чувствительность может быть обусловлена как доминированием механизма, чувствительного к перпендикулярно контактам излучению, так и локальным усилением электрического поля металлическими контактами.

Литература

1. *Mueller T. et al.* Graphene photodetectors for high-speed optical communications // *Nature Photon.* 4, 297–301 (2010).
2. *Mittendorff M. et al.* Ultrafast graphene-based broadband THz detector // *Appl. Phys. Lett.* 103, 021113 (2013).
3. *Cai X. et al.* Sensitive room-temperature terahertz detection via the photothermoelectric effect in graphene // *Nat. Nanotech* 9, 814–819 (2014).

4. *Castilla S. et al.* Fast and Sensitive Terahertz Detection Using an Antenna-Integrated Graphene pn Junction // *Nano Lett.* 2019, 19, 5, 2765–2773 (2019).
5. *Echtermeyer T. et al.* Photothermoelectric and Photoelectric Contributions to Light Detection in Metal–Graphene–Metal Photodetectors // *Nano Lett.* 14, 3733 (2014).
6. *Bandurin D. et al.* Dual origin of room temperature sub-terahertz photoresponse in graphene field effect transistors // *Appl. Phys. Lett.* 112, 141101 (2018).
7. *Nikulin E. et al.* Edge diffraction, plasmon launching, and universal absorption enhancement in two-dimensional junctions // *Phys. Rev. B* 103, 085306 (2021).

УДК 538.915

InGaS₃, оптические и электронные свойства

А. Н. Токсумаков^{1,2}, Г. А. Ермолаев¹, Н. В. Дорошина¹, Д. И. Якубовский¹, А. В. Сюй¹, З. И. Попов², Д. Г. Квашини², А. В. Арсенин¹, Д. А. Казарян¹, В. С. Волков¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН

В настоящей работе представлены результаты исследований оптических и электронных свойств новой стехиометрической фазы кристаллов InGaS₃ с гексагональной кристаллической решеткой, в частности, электронная плотность состояний (eDOS), электронная зонная структура, показатель преломления, коэффициент экстинкции, спектры КР, и спектры отражения-пропускания.

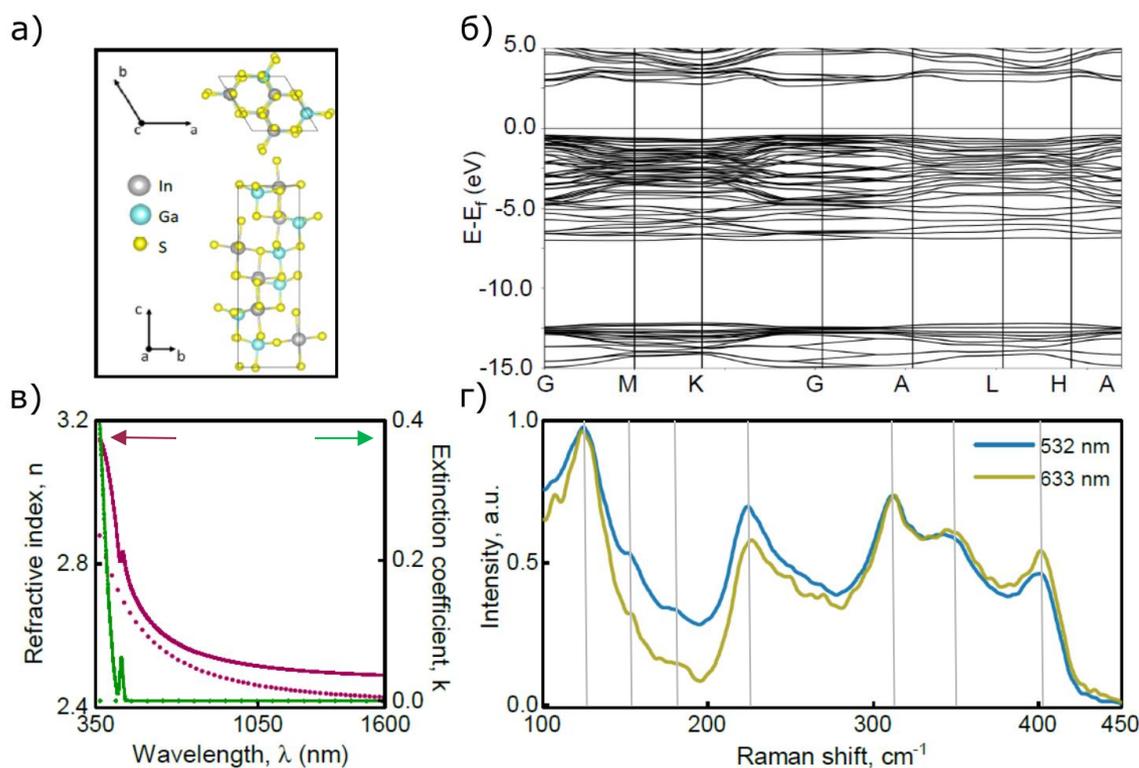


Рис. 1. Структура и свойства InGaS₃. (а) Схематическое изображение кристаллической структуры InGaS₃; б) Электронная зонная структура, рассчитанная методом HSE; в) Экспериментальные оптические постоянные (n, k) в диапазоне длин волн 350–1600 нм; г) Экспериментальные КР спектры

Рассматриваемые кристаллы InGaS₃ имеют гексагональную структуру пространственной группы *P6₃* и постоянные решетки $a = 6.6 \text{ \AA}$, $c = 17.9 \text{ \AA}$ (рис. 1а). Структура кристаллов исследована с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) на образцах толщиной ~ 20 нм, полученных стандартным методом механического расщепления и последующего «жидкого» переноса на ПЭМ сетки.

Теоретическое исследование электронных свойств InGaS₃ с гексагональной кристаллической структурой было проведено методом функционала электронной плотности (DFT)¹ и с использованием

программного пакета VASP. Расчетное значение ширины запрещенной зоны составляет $E_g = 3.0$ эВ. Квантово-механические расчеты были проведены в рамках приближения обобщенного градиента GGA² и гибридного функционала HSE³, а электрон-ионные взаимодействия описывались псевдопотенциалами PAW⁴. Зонная структура InGaS₃, рассчитанная при помощи HSE включая k-точки: G-> M-> K-> G-> A-> L-> H-> A первой зоны Бриллюэна, приведена на рис. 1б. (здесь энергия электронов рассчитывается в диапазоне от -15.0 до 5.0 эВ, а энергия Ферми смещена к нулю для простоты чтения).

Для изучения оптических свойств InGaS₃ была использована спектроскопическая эллипсометрия (SE) аналогична работам [5, 6]. Оптические постоянные InGaS₃ были рассчитаны путем поточечной подгонки⁷ к спектрам эллипсометрии с использованием алгоритма Левенберга–Марквардта и аппроксимированы на кривую с помощью модели осцилляторов Таук–Лоренца (TL)⁵, согласно работе [6]:

$$\varepsilon_2 = \begin{cases} \frac{1}{E} * \frac{AE_0C(E - E_g)^2}{(E^2 - E_0^2)^2 + C^2E^2}, & E > E_g, \\ 0, & E < E_g \end{cases}$$

где A – сила осциллятора, E – энергия фотона, C – параметр уширения, E₀ – пиковая центральная энергия, E_g – оптическая ширина запрещенной зоны. Таким образом, E_{exc} ≈ 2,67 эВ, ширина запрещенной зоны E_g ≈ 2,73 эВ. Следовательно, энергия связи экситона E_{binding} ≈ E_g – E_{exc} ≈ 60 мэВ. Экспериментальные значения показателя преломления и коэффициента экстинкции приведены на рис. 1в.

Литература

1. Zhang, Y. & Yang, W. Comment on «Generalized Gradient Approximation Made Simple» // Phys. Rev. Lett. 80, 890–890 (1998).
2. Perdew, J. P., Ernzerhof, M. & Burke, K. Rationale for mixing exact exchange with density functional approximations // J. Chem. Phys. 105, 9982–9985 (1996).
3. Perdew, J. P., Burke, K. & Ernzerhof, M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. 77, 3865–3868 (1996).
4. Ermolaev, G. A., Yakubovsky, D. I., Stebunov, Y. V., Arsenin, A. V. & Volkov, V. S. Spectral ellipsometry of monolayer transition metal dichalcogenides: Analysis of excitonic peaks in dispersion // Journal of Vacuum Science & Technology B 38, 014002 (2020).
5. Ermolaev, G. A. et al. Broadband optical properties of monolayer and bulk MoS₂ // npj 2D Mater Appl 4, 21 (2020).
6. Tompkins, H. & Irene, E. A. Handbook of Ellipsometry (William Andrew, 2005).

УДК 538.9

Оже-рекомбинация в сильных электромагнитных полях

Г.В. Алымов

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

В современной физике активно исследуются процессы, происходящие в полупроводниках в сильных электромагнитных полях, возникающих при облучении мощными лазерными импульсами. В частности, интенсивные межзонные переходы могут приводить к гибридизации состояний зоны проводимости и валентной зоны с образованием новых щелей в энергетическом спектре электронов (рис. 1). Такое состояние полупроводника называется *топологическим изолятором Флоке* (Floquet topological insulator [1]) и отличается по своим транспортным свойствам от обычного полупроводника [2]. Кроме новых щелей в спектре, в сильном электромагнитном поле появляются реплики зоны проводимости и валентной зоны c'/v' , лежащие на $\hbar\Omega$ ниже или выше (рис. 1).

В настоящей работе мы исследуем влияние сильного электромагнитного поля на кинетику носителей в полупроводнике, а именно на процессы оже-рекомбинации. Оже-рекомбинация – электрон-

дырочная рекомбинация с передачей энергии третьему носителю – была выбрана как процесс, наиболее чувствительный к особенностям закона дисперсии носителей: в некоторых материалах она может быть вообще запрещена законами сохранения [3] (в пренебрежении многочастичными процессами).

На примере одного из таких материалов, графена с запрещённой зоной (которая может возникать в нанополосках, на определённых подложках или при химическом легировании), мы показываем, что в присутствии электромагнитного поля запрет на оже-рекомбинацию со стороны законов сохранения снимается (рис. 1). Из-за усложнения закона дисперсии носителей появляется много различных типов оже-рекомбинации, темпы которых степенным образом зависят от интенсивности падающего излучения (рис. 2). Доминирующими среди них оказываются процессы с участием одной из реплик зон – например, $cc \rightarrow v'c$ (рис. 1).

Суммарный темп оже-рекомбинации в графене с запрещённой зоной линейно зависит от интенсивности падающего излучения и при интенсивностях порядка сотен мВт/мкм² достигает значений, сопоставимых с темпом оже-рекомбинации для бесщелевого графена (в котором она разрешена законами сохранения). Таким образом, в присутствии сильного электромагнитного поля оже-рекомбинация может быть одним из важнейших процессов, стремящихся вернуть фотовозбуждённую систему в состояние равновесия, даже если в невозмущённом полупроводнике она запрещена или сильно подавлена.

Работа выполнена при поддержке стипендии Президента РФ № СП-5270.2021.5.

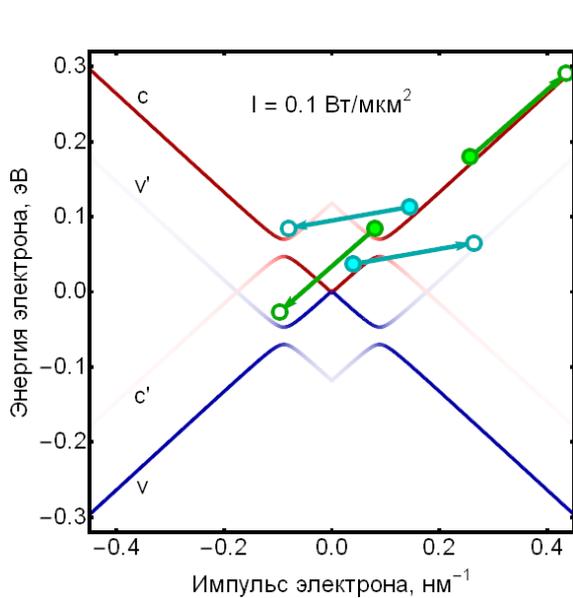


Рис. 1. Закон дисперсии электронов в графене с запрещённой зоной 0.1 эВ при воздействии на него ИК-излучения ($\lambda = 10.6 \text{ мкм}$) интенсивностью 0.1 Вт/мкм² с круговой поляризацией. Зоны c' , v на самом деле является компонентами одной волновой функции, осциллирующими с разной частотой, как и c , v' . Амплитуда этих компонент показана интенсивностью цвета. Стрелками показаны некоторые возможные оже-процессы

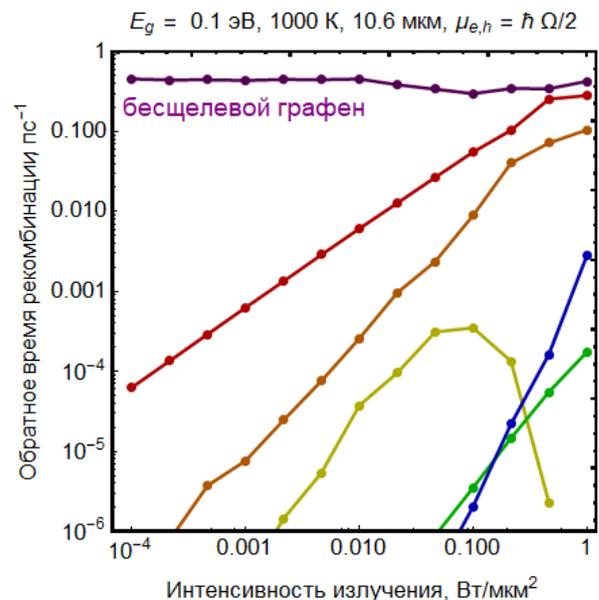


Рис. 2. Зависимость обратного времени оже-рекомбинации в графене с запрещённой зоной от интенсивности падающего излучения. Разными цветами показаны различные группы оже-процессов; верхняя кривая – темп рекомбинации в бесщелевом графене (полный). Температура носителей – 1000 К, квазиуровни Ферми выбраны из предположения о насыщении поглощения, остальные параметры совпадают с рис. 1

Литература

1. Rudner M.S., Lindner N.H. Band structure engineering and non-equilibrium dynamics in Floquet topological insulators // Nature reviews physics 2020. V. 2, N 5. P. 229–244.
2. Kristinsson K., Kibis O.V., Morina S., Shelykh I.A. Control of electronic transport in graphene by electromagnetic dressing // Scientific reports 2016. V. 6, N 1. P. 1–7.
3. Alymov G., Svintsov D., Vyurkov V., Ryzhii V., Satou A. Auger recombination in Dirac materials: a tangle of many-body effects // Physical Review B 2018. V. 97. P. 205411.

Гибридные структуры металл-диэлектрик-металл для применения в ГКР

М.К. Татмышевский¹, Д.И. Якубовский¹, О.О. Капитанова², В.Р. Соловей¹, Г.А. Ермолаев¹, Ю.А. Клишин¹, М.С. Миронов¹, А.А. Воронов¹, А.В. Арсенин¹, В.С. Волков¹, С.М. Новиков¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Разработка эффективно воспроизводимых плазмонных наноструктур с контролируемым усилением поля является важной задачей для развития сенсорных методов, в особенности для спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния (ГКР). Одним из перспективных вариантов является создание гибридных наноструктур, включающих в себя различные типы материалов [1, 2]. В данной работе экспериментально исследуются структуры Si/Au/SiO₂ и Si/Au/SiO₂/graphene с ультратонкими пленками золота вблизи порога перколяции и возникающие эффекты усиления поля характеризуются с помощью снятия сигнала ГКР от красителя Crystal Violet. Ожидается, что в такой геометрии общее усиление поля связано с двумя факторами: возбуждением щелевых плазмонов [3] и усилением вблизи «горячих точек» в нанозазорах между кластерами Au [4, 5].

Ультратонкие пленки золота толщиной от 3 до 9 нм с шагом 1 нм наносились на три типа подложек: предметные стекла, кремниевые пластины с 100 нм слоем золота и 50 нм SiO₂, и такие же структуры с дополнительным слоем CVD графена поверх SiO₂. Схематически изготовленные подложки изображены на рис. 1а-с. Толщина SiO₂ была подтверждена с помощью эллипсометрии. Пленки золота для всех типов подложек осаждались в одном режиме электронно-лучевым испарением на установке Nano Master NEE-4000. Для каждой отдельной толщины пленки наносились за один цикл сразу на все три типа подложек.

Морфология полученных пленок изучалась с помощью сканирующего электронного микроскопа JEOL JSM-7001F (JEOL Ltd., Токио, Япония) и атомно-силового микроскопа NT-MDT Ntegra (Москва, Россия). Удельные сопротивления полученных пленок с целью определения порога перколяции проводились при помощи четырехзондовой станции (Jandel Engineering Ltd., Линслейд, Великобритания) с коллинеарной геометрией.

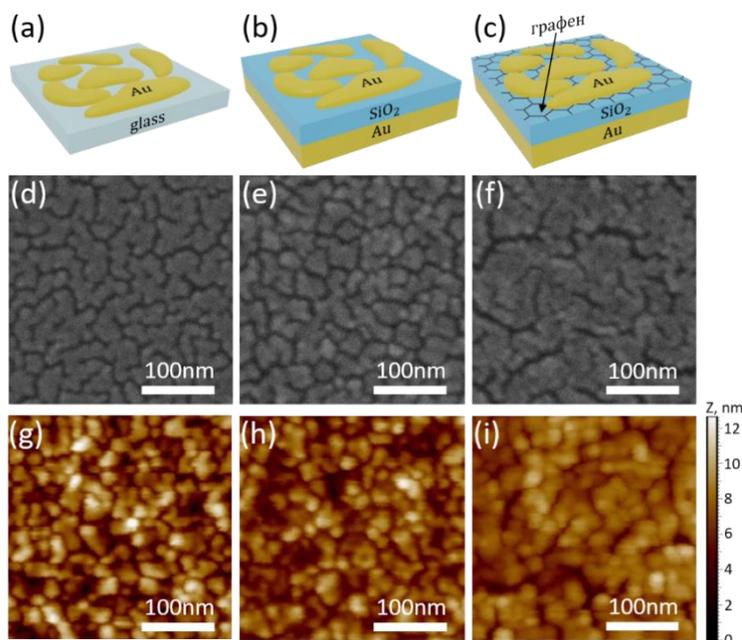


Рис. 1. (а)–(с) Схематические 3D изображения изготовленных ГКР структур, (d)–(f) SEM изображения и (g)–(i) AFM изображения ультратонких 6 нм золотых пленок на всех трех типах структур

Для измерений комбинационного рассеяния использовался микроскоп Horiba LabRAM HR Evolution (HORIBA Ltd., Киото, Япония). Все измерения проводились с использованием линейно поляризованного возбуждения с длиной волны 632,8 нм, дифракционной решетки 600 линий /мм и объектива $\times 100$ (N.A. = 0,90). Все спектры были сняты при мощности лазера 0,25 мВт и времени накопления 3с. Данный выбор параметров обусловлен необходимостью компромисса между отношением

сигнал/шум и выгоранием молекул Crystal Violet. Перед измерением все подложки покрывались водным раствором 10^{-6} М красителя Crystal Violet в течение 1 часа, после чего аккуратно высушивались сжатым воздухом. Также для определения коэффициентов усиления ГКР были сняты спектры комбинационного рассеяния Crystal Violet в концентрации 10^{-2} М на чистой стеклянной подложке. Коэффициенты усиления рассчитывались по формуле (1):

$$EF = \frac{I_{ГКР} C_{КР}}{I_{КР} C_{ГКР}} . \quad (1)$$

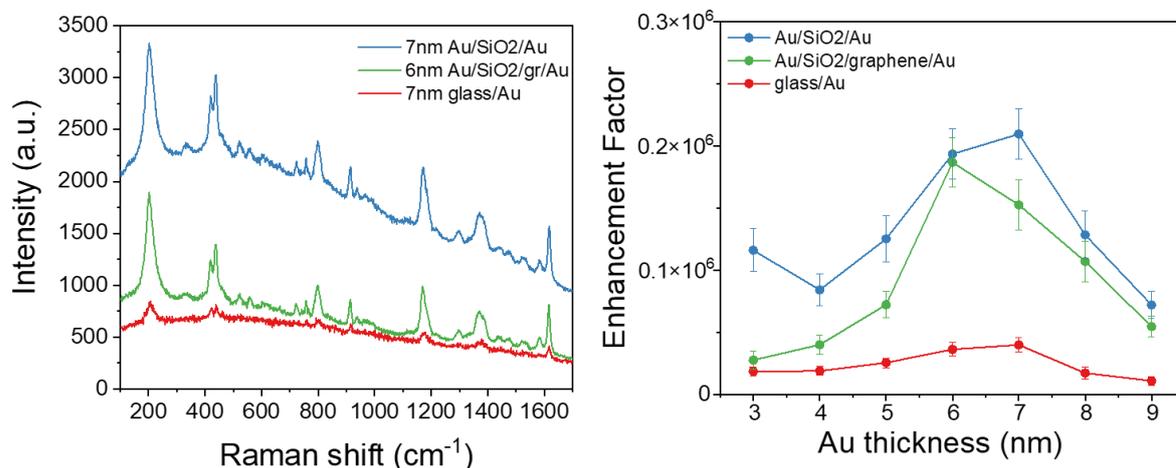


Рис. 2. (а) Примеры типичных спектров ГКР, полученных от красителя Crystal Violet нанесённого на три типа структур (б) Зависимость коэффициентов усиления ГКР от толщины золотой пленки для трех типов структур, рассчитанная по интенсивности моды 207 см^{-1}

Спектры ГКР для подложек каждого типа с наибольшими коэффициентами усиления продемонстрированы на рис. 2а. На рис. 2б показана зависимость коэффициента усиления для всех трех типов подложек в зависимости от толщины ультратонкой золотой пленки. Для многослойных структур с диэлектрической прослойкой SiO_2 и рефлекторным слоем золота наблюдалась интенсивность ГКР до 7 раз выше по сравнению с пленками золота вблизи порога перколяции, нанесенными на стеклянную подложку. Также тесное прилегание анализита к графену на структурах с его использованием эффективно гасит флуоресцентный фон. Полученные результаты показывают, что комбинирование ультратонких пленок золота вблизи порога перколяции с щелевыми плазмонными резонансами является многообещающим для разработки высокоэффективных ГКР-подложек.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (20-07-00475 и 20-33-70264).

Литература

1. *Fateixa S., Nogueira H.I.S., Trindade T.* Hybrid nanostructures for SERS: materials development and chemical detection // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015. V. 17. P. 21046–21071.
2. *Eremina O.E., Kapitanova O.O., Goodilin E.A., Veselova I.A.* Silver-chitosan nanocomposite as a plasmonic platform for SERS sensing of polyaromatic sulfur heterocycles in oil fuel // *Nanotechnology* 2020. V. 31. P. 225503
3. *Baumberg J.J., Aizpurua J., Mikkelsen M.H., Smith D.R.* Extreme nanophotonics from ultrathin metallic gaps // *Nat. Mater.* 2019. V. 18. P. 668–678.
4. *Moskovits M.* Spot the hotspot // *Nature.* 2011. V. 469. P. 307–308.
5. *Novikov S.M., Frydendahl C., Beermann J., Zenin V. A., Stenger N., Coello V., Mortensen N.A., Bozhevolnyi S.I.* White Light Generation and Anisotropic Damage in Gold Films near Percolation Threshold // *ACS Photonics.* 2017. V. 4. P. 1207–1215.

Изучение оптически-индуцированного спинового эффекта Холла в структуре феррит-гранат/топологический изолятор

Д.С. Гозуева¹, П.В. Шилина^{1,2}

¹Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

На сегодняшний день технический прогресс не стоит на месте. Миниатюризация электроники является неотъемлемым этапом для создания инновационных устройств. Основными сложностями, возникающими при реализации подобных систем, являются энергетические потери, появляющиеся при протекании электрического заряда во время передачи и обработки информации. Возможным подходом к увеличению достаточной производительности устройств и, как следствие, уменьшением энергетических потерь, является использование спинового тока вместо зарядового. Если спиновый ток \vec{j}_s , образованный в результате упорядоченного движения электронов в противоположные стороны с различными спинами генерировать без переноса заряда (\vec{j}_c зарядовый ток равен нулю), то есть возможность избежать потерь, относящихся к электрическому сопротивлению.

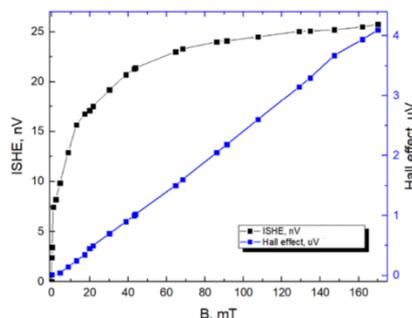


Рис. 1. Зависимости оптически индуцированных напряжений от внешнего магнитного поля в образцах с различной толщиной топологического изолятора (ISHE (черная кривая) – для образцов с толщиной 100 нм, Hall effect (синяя кривая) - для образцов с толщиной 200 нм)

В данной работе был изучен переход спинового эффекта Холла к классическому эффекту Холла в внешнем магнитном поле в слое топологического изолятора (BiSbTeSe_2), нанесенного на подложку из феррит-граната ($(\text{YBi})_2(\text{FeAlSc})_5\text{O}_{12}$). Исследуемый образец помещался во внешнее магнитное поле и облучался диодным лазером с длиной волны 780 нм. При облучении образца лазером в ферромагнитном материале с нанесенным на него топологическим изолятором в слое феррит-граната генерируется спиновый ток. Направление спинового тока определяется явлением спинового эффекта Зеебека (ток направлен параллельно градиенту температур). В слое топологического изолятора из-за обратного спинового эффекта Холла течёт зарядовый ток:

$$\vec{j}_c = \theta_{sh} \frac{2e}{h} [\vec{j}_s \times \vec{\sigma}] \quad \vec{j}_c = \theta_{sh} \frac{2e}{h} [\vec{j}_s \times \vec{\sigma}]. \quad (1)$$

Зарядовый ток перпендикулярен направлению внешнего магнитного поля и направлению спинового тока. Оптически индуцированное напряжение снималось с помощью прикрепленных к поверхности образца электродов. Крепление производилось с использованием проводящего клея. Далее сигнал усиливался на дифференциальном усилителе, с коэффициентом усиления 1000 и оцифровывался с помощью платы сбора данных National Instruments USB6351. Последующий этап обработки сигнала состоял в фурье-преобразовании.

В работе были получены зависимости экваториального магнитооптического эффекта Керра и обратного спинового эффекта Холла от величины внешнего магнитного поля. Из полученных зависимостей для экваториального эффекта Керра был сделан вывод, что насыщение в образце достигается при значении внешнего магнитного поля равном 100 мТл. В ходе исследования обратного спинового эффект Холла было выявлено, что для некоторых образцов поведение зависимости оптически индуцированного напряжения от величины внешнего магнитного поля носит линейный характер. Данное по-

ведение кривой было объяснено тем, что существует граничная толщина, выше которой обратный спиновый эффект Холла подавляется классическим эффектом Холла. Зависимость оптически-индуцированного напряжения от внешнего магнитного поля для двух различных толщин топологического изолятора представлена на (рис. 1)

Работа поддержана грантом РФФ N 17-12-01333.

Литература

1. *Sinova J. et al.* Spin Hall effects // *Reviews of Modern Physics*. 2015. V. 87, N 4. С. 1213.
2. *Uchida K. et al.* Observation of the spin Seebeck effect // *Nature*. 2008. V. 455, N 7214. С. 778–781.
3. *Hasan M. Z., Kane C. L.* Colloquium: topological insulators // *Reviews of modern physics*. 2010. V. 82, N 4. С. 3045.

УДК 539.958

Спектральная эллипсометрия атомарно тонких кристаллов

*И.В. Бегичев^{1,2}, Ю.А. Клишин¹, А.Н. Токсумаков^{1,3}, Г.А. Ермолаев¹, Д.И. Якубовский¹,
А.В. Арсенин¹, Д.А. Казарян¹, В.С. Волков¹*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Сколковский институт науки и технологий (Сколтех)

³Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН

В рамках данной работы, методами механического расщепления и «сухого» переноса на основе полимерных пленок, изготовлены и помещены на стеклянные и кварцевые подложки гетероструктуры, состоящие из атомарных слоев гексагонального нитрида бора и графена. Изготовленные образцы исследованы и охарактеризованы методами спектроскопии комбинационного рассеяния и атомно-силовой микроскопии. Было показано, что слои графена имеют толщину ровно в один атом и что загрязненность образцов незначительна. Оптический отклик от полученных образцов изучался методом спектральной эллипсометрии. Измерения были проведены при различных углах падения светового пучка на образец в видимом диапазоне длин волн в двух случаях: до переноса однослойного графена, и после (рис. 1).

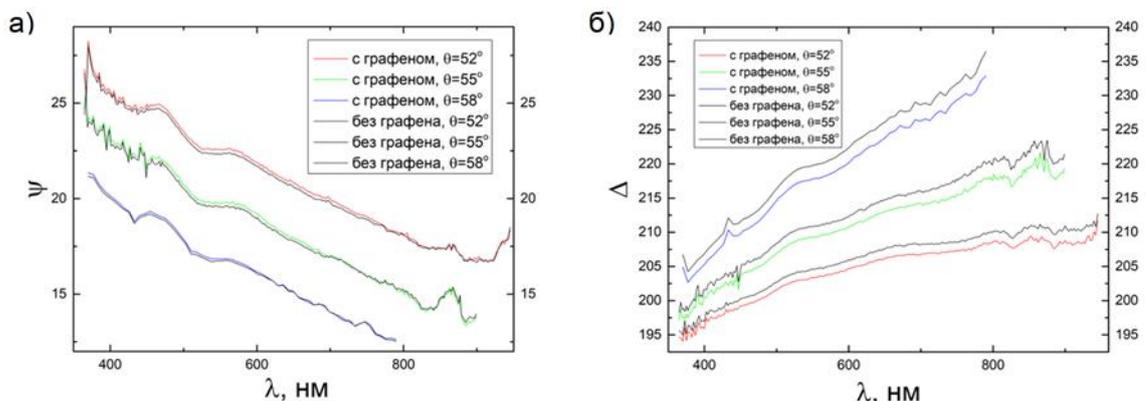


Рис. 1. Экспериментальные значения эллипсометрических углов; ψ (а) и Δ (б), в зависимости от длины волны падающего излучения

В работе было применено несколько модельных подходов по извлечению оптических постоянных графена из эллипсометрических данных. Первый подход заключался в подборе наиболее подходящих параметров дисперсионной зависимости Друде–Лоренца статистическими методами [1]. Второй, в рассмотрении набега фазы в графене как малый параметр возмущений [2]. Используя метод трансфер-матрицы для расчета отражения и прохождения света, было получено соотношение, которое можно использовать для нахождения оптических постоянных графена:

$$-2ik_0d \left(\frac{n_{\text{sub}}^2 - \sin^2 \theta}{n_{\text{sub}}^4 - n_{\text{sub}}^2 + \sin^2 \theta} \frac{\varepsilon^2 - n_{\text{sub}}^2 \varepsilon + n_{\text{sub}}^2 \sin^2 \theta}{\varepsilon} - \frac{\varepsilon - \sin^2 \theta - n_{\text{sub}}^2}{n_{\text{sub}}^2 - \sin^2 \theta - 1} \right) = \frac{\delta\psi}{\sin \psi \cos \psi} + i\delta\Delta \quad (1)$$

В этом соотношении, k_0 – это волновое число падающего света, d – толщина изучаемого тонкого слоя, n_{sub} – показатель преломления подложки, θ – угол падения света на образец, ψ и Δ – измеренные эллипсометрические углы, соответственно. Оно позволяет обработку данных, не предполагая заранее

никакого вида зависимости оптических постоянных от длины волны. И соответственно оптические постоянные можно получить из этого соотношения, разрешив уравнение относительно них. Оба подхода (статистический и аналитический) были применены к системе «стекло-гексагональный нитрид бора-графен». Соотношения, подобные (1), были получены также из первых принципов при рассмотрении решений уравнений Максвелла в графене [3]. В данном случае оказывается возможным учесть анизотропию атомарно тонкого слоя. Важным результатом работы является несколько вариаций вычислительных процедур, позволяющих получать данные об оптических свойствах атомарно тонких кристаллов, исходя из проведенных измерений до и после нанесения очередного атомарного слоя.

Литература

1. *M. A. El-Sayed, G. A. Ermolaev, K. V. Voronin et al.* Optical constants of chemical vapor deposited graphene for photonic applications // *Nanomaterials* 11 (5), 1230 (2021).
2. *J. Lekner.* Analytic inversion of ellipsometric data for an unsupported nonabsorbing uniform layer // *J. Opt. Soc. Am. A* 7, 1875–1877 (1990).
3. *P. Drude, C. R. Mann, R. A. Millikan.* The theory of optics // New York: Longmans, Green, and Co. (1903).

УДК 537.9

Терагерцовая-инфракрасная спектроскопия колебательных состояний ионов лития, локализованных в наноразмерных порах фуллеренов

Д.А.Юламанова¹, С.С.Жуков¹, М.А.Белянчиков¹, А.В.Мелентьев¹, П.А.Жиляев², Н.Д.Орехов¹, Shinobu Aoyagi³, Б.Горицунов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),

²Сколковский институт науки и технологий

³Nagoya City University, Nagoya, Japan

Волновые функции ионов лития, локализованные в наноразмерных полостях фуллеренов C₆₀, практически не перекрываются, и их взаимодействие обусловлено только кулоновскими силами. Поэтому подобные объекты Li@C₆₀ позволяют искать и исследовать новые состояния квантовых систем с электро-дипольным взаимодействием. В работах [1–4] исследовалась система Li@C₆₀(PF₆) в терагерцовом диапазоне частот. В настоящей работе были проведены исследования системы, состоящей из эндофуллеренов изотопов катионов лития (⁶Li⁺, ⁷Li⁺), окруженных ионами PF₆ - ⁶Li@C₆₀(PF₆) и ⁷Li@C₆₀(PF₆) (см. рис. 1 вставка). Исследования проводились при температурах 5–300 К методами терагерцовой импульсной спектроскопии в диапазоне частот от 5 до 100 см⁻¹, и инфракрасной фурье-спектроскопии в диапазоне частот от 40 до 1000 см⁻¹.

Исследуемые образцы представляли собой таблетки спрессованных порошков ⁶Li@C₆₀(PF₆) и ⁷Li@C₆₀(PF₆) с толщинами 158 мкм и 88 мкм, соответственно. С помощью импульсного терагерцового спектрометра TeraView TPS Spectra 3000 были измерены спектры пропускания и комплексной диэлектрической проницаемости в диапазоне частот 5–100 см⁻¹. Измерения спектров пропускания в инфракрасной области проводились с помощью фурье-спектрометра Bruker V80 при температурах от комнатной до гелиевой в диапазоне частот 40–1000 см⁻¹. На рис. 1 приведены спектры пропускания образцов с ⁶Li@C₆₀(PF₆), измеренные при температурах 5, 180 и 300 К.

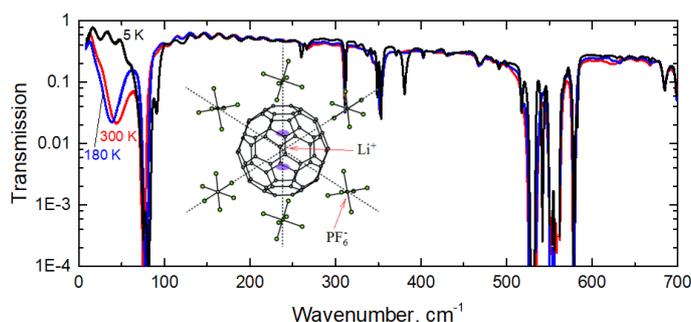


Рис. 1. Спектры пропускания прессованного образца ⁶Li@C₆₀(PF₆) при температуре 5, 180 и 300 К. На вставке показано схематическое изображение элементарной ячейки системы ⁶Li@C₆₀(PF₆) при температуре 40 К [2]

Для определения спектров комплексной диэлектрической проницаемости в инфракрасной области экспериментальные терагерцовые и инфракрасные спектры пропускания обрабатывались в рамках модели Друде–Лоренца. Результат определения спектра мнимой части диэлектрической проницаемости ε_2 для системы с ${}^6\text{Li}@C_{60}(\text{PF}_6)$ показан на рис. 2. В приведенных спектрах линии, связанные с собственными колебаниями матрицы чистых фуллеренов C_{60} , исключены путем зануления вкладов соответствующих резонансов, идентифицированных на основе измерений спектров спрессованных образцов C_{60} . Для примера синей пунктирной линией приведен полный спектр – без исключения собственных линий фуллерена.

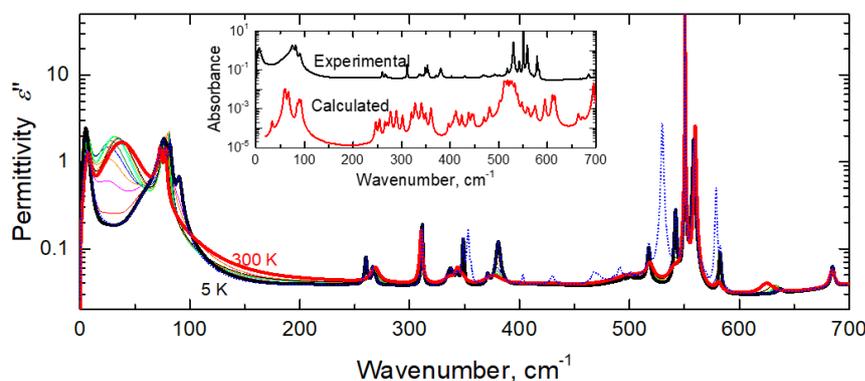


Рис. 2. Температурные зависимости мнимой части диэлектрической проницаемости для образца ${}^6\text{Li}@C_{60}(\text{PF}_6)$. Сплошными линиями показаны модельные спектры с исключёнными линиями поглощения чистого фуллерена. Голубая пунктирная линия демонстрирует полный спектр системы при температуре 5 К. На вставке приведены расчетный (красная линия) и экспериментальный (черная линия) спектры поглощения. Экспериментальная кривая сдвинута по оси ординат для удобства

Модельный анализ спектров позволил установить характер температурных зависимостей параметров линий поглощения. Для выявления природы наблюдаемых линий поглощения был произведен расчет инфракрасного спектра поглощения ${}^6\text{Li}@C_{60}(\text{PF}_6)$ методами теории функционала плотности (ТФП) [5, 6]. Динамическая матрица была рассчитана в рамках линейной теории возмущений, ширина линий поглощения была задана вручную. На вставке рис. 2 сравниваются спектры поглощения, полученные из экспериментальных данных при температуре 5 К и методом ТФП.

Литература

1. *Kwon E. et al.* Dynamic behavior of lithium-cation in a C_{60} fullerene cage elucidated by terahertz spectroscopy // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 2014. V. 598: P. 28–31.
2. *Suzuki H. et al.* Rotational dynamics of Li^+ ions encapsulated in C_{60} cages at low temperatures // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016. V. 18, P. 31384–31387.
3. *Suzuki H. et al.* The thermodynamic properties and molecular dynamics of $[\text{Li}@C_{60}](\text{PF}_6)$ associated with structural phase transitions // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2019. DOI: 10.1039/c9cp02849h.
4. *Aoyagi S. et al.* Tunneling motion and antiferroelectric ordering of lithium cations trapped inside carbon cages // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2016. V. 85, P. 094605.
5. *Kresse G. et al.* Ab initio molecular dynamics for liquid metals // *Phys. Rev.* 1993. V. 47, P. 558.
6. *Kresse G. et al.* Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals // *Comput. Mat. Sci.* 1996. V. 6, P. 15.

УДК 538.958

Симметрично-защищённые ССК в двумерно-периодической плазмон-волноводной структуре

Д.П. Марков^{1,2}, С.И. Павлов¹, С.А. Дьяков³, Н.А. Феоктистов¹, А.В. Нащекин¹, А.Б. Певцов¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе

²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

³Сколковский институт науки и технологий

Связанные состояния в континууме (ССК) в последнее время привлекают всё большее внимание в фотонике в связи с перспективой их применения для создания новых типов лазеров [1], сверх-

чувствительных сенсоров [2], оптических фильтров [3] и др. ССК являются неизлучающими и теоретически обладают бесконечной добротностью, при этом остаются локализованными, даже когда их энергия попадает в диапазон непрерывного спектра системы. Недавно наличие ССК было подтверждено для одномерных плазмонных решёток [4], а также аналитически показана перспектива их дальнейшего использования [5].

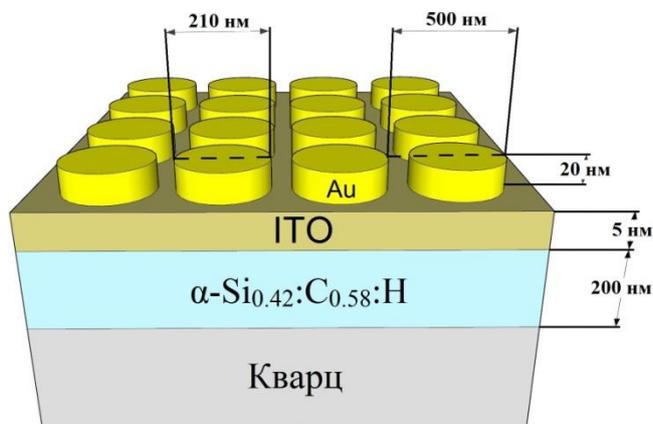


Рис. 1. Схематическое изображение исследуемой структуры

Целью данной работы являлось создание плазмонных наноструктур с двумерной периодичностью на поверхности волновода для изучения оптических свойств ССК. Периодичность в двух направлениях дает большую степень свободы для точной подстройки геометрии структуры для возбуждения широкого спектра оптических резонансов, по сравнению с одномерным случаем. Возбуждение гибридных плазмон-волноводных решёточных резонансов в данной структуре предположительно позволяет наблюдать один из типов ССК.

Исследуемые образцы представляют собой двумерные массивы золотых нанодисков, расположенных на слое гидрогенизированного аморфного кремний-углеродного сплава ($\alpha\text{-Si}_{0.42}\text{C}_{0.58}\text{H}$) (см. рис. 1). Слой $\alpha\text{-Si:C:H}$ был сформирован при помощи плазмохимического газофазного осаждения, толщина слоя составила 210 нм. Изготовление плазмонной двумерной решётки было выполнено методом электронно-лучевой литографии, 5 нм подслой ITO служил для адгезии золота и обеспечения стока заряда при экспонировании. Затем методом вакуумного термического осаждения наносился слой золота толщиной 20 нм. Диаметр нанодисков составлял 210 нм, период решётки – 500 нм.

На изготовленных структурах методом спектральной фурье-микроскопии были получены угловые зависимости спектров отражения при двух типах поляризации: *p* и *s* (рис. 2). На спектрах можно увидеть, что минимумы и максимумы интенсивности формируют набор «треков», которые могут быть описаны как дисперсионные кривые собственных мод структуры. Наличие волноводного слоя $\alpha\text{-Si:C:H}$ позволяет наблюдать особенности в оптических спектрах, связанные с возбуждением волноводных мод. Их спектральное положение было рассчитано на основе уравнения мод тонкоплёночного волновода и отмечено синим и оранжевым пунктиром на рис. 2.

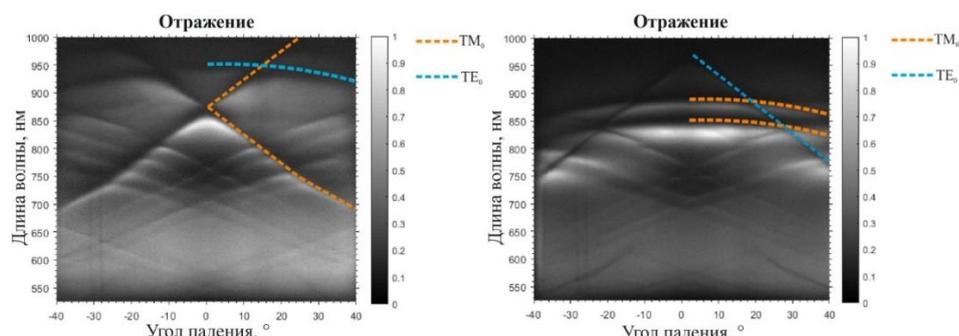


Рис. 2 Угловые зависимости спектров отражения при *p*- и *s*-поляризациях, соответственно

Поскольку двумерная решетка состоит из золотых нанодисков, в структуре возбуждался локализованный плазмонный резонанс (ЛПР), который можно наблюдать на рис. 2 в виде максимумов отражения в области 820–870 нм. Также возникновение ЛПР может приводить к образованию связанных

гибридных плазмон-волноводных мод, которые можно наблюдать в области пересечения ЛППР и соответствующей волноводной моды.

В случае нормального падения света в области 870–890 нм для *p*-поляризации наблюдается резкая смена максимумов отражения на минимумы. Учитывая периодичность структуры в двух направлениях и чётность обозначенных мод, такое поведение может свидетельствовать о наличии симметрично-защищённых ССК [6].

Литература

1. *Rybin M. et al.* High-Q Supercavity Modes in Subwavelength Dielectric Resonators // *Phys. Rev. L.* 2017. V. 119. P. 24390.
2. *Gomis-Bresco J., Artigas D. & Torner L.* Anisotropy-induced photonic bound states in the continuum // *Nature Photon* 2017. V. 11 P. 232–236.
3. *Liang Y. et al.* Bound states in the continuum in anisotropic plasmonic metasurfaces // *Nano Lett.* 2020. V. 20 P. 6351.
4. *Joseph S., Sarkar S., Khan S., Joseph J.* Exploring the Optical Bound State in the Continuum in a Dielectric Grating Coupled Plasmonic Hybrid System // *AdV. Optical Mater.* 2021. V. 9 P. 2001895.
5. *Yang Y., Peng C., Liang Y., Li Z., & Noda S.* Analytical Perspective for Bound States in the Continuum in Photonic Crystal Slabs // *Phys. Rev. L.* 2020. V. 113(3). P. 037401.
6. *Hsu C. et al.* Bound states in the continuum // *Nat Rev Mater* 2016. V. 1 P. 16048.

УДК 533.922

Изучение нового поколения кремниевых волноводов с помощью ближнепольной оптической микроскопии

Д.В. Грудинин, Г.А. Ермолаев

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Кремний уже много лет является лидирующим материалом для создания фотонных интегральных схем [1]. Как следствие, становится все сложнее улучшать показатели устройств на основе данного материала. Для этого ученые придумывают все более сложные методы для этого [2, 3], увеличивая сложность фабрикаций таких структур. В этой работе мы предлагаем новый тип кремниевых волноводов, которые не так сложны в производстве и имеют очень высокий уровень локализации моды.

Для создания нового поколения кремниевых волноводов в качестве одной из обкладок был использован материал с высоким показателем вне плоскостной анизотропии [4]. Мы провели теоретический анализ, фабрикации и изучение оптических свойств кремниевых волноводов структуры Air/Si/WS₂-glass. Для создания этой структуры была проведена эксфолиация хлопьев дисульфида вольфрама, материала, обладающего высоким уровнем двулучепреломления, на стеклянную подложку. Затем образец был покрыт кремнием, после чего из полученного слоя Si/WS₂ были вытравлены волноводы различной ширины.

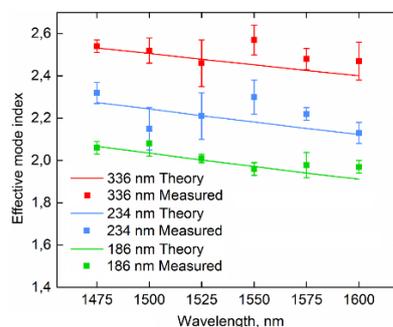


Рис. 1. Сравнение теоретической и экспериментальной дисперсий для разных ширин волноводов

Для характеристики свойств оптических мод, распространяющихся внутри волноводов использовалась установка рассеивающей сканирующей ближнепольной оптической микроскопии (*p*-СБОМ, NeaSNOM, neaspec), позволяющая одновременно снимать данные по амплитуде и фазе распространяющихся поверхностных мод. Для возбуждения мод использовался волоконный лазер телекоммуникационного диапазона длин волн 1475–1610 нм. Также авторами разработан алгоритм фильтрации от шумов изображений снимаемого ближнепольного сигнала. Получена дисперсионная зависимость для трёх волноводов различной ширины.

Полученные результаты свидетельствуют о возможности создания нового типа фотонных волноводов, которые приближаются по размерам к плазмонным волноводам. Это может послужить следующим шагом для развития фотонных интегральных схем.

Литература

1. *B. Jalali and S. Fathpour, «Silicon Photonics,» in Journal of Lightwave Technology, V. 24, N 12, P. 4600–4615, Dec. 2006, doi: 10.1109/JLT.2006.885782.*
2. *Urbonas, D., Mahrt, R.F. & Stöferle, T. Low-loss optical waveguides made with a high-loss material. Light Sci Appl 10, 15 (2021).*
3. *Su, Y., Zhang, Y., Qiu, C., Guo, X., Sun, L., Silicon Photonic Platform for Passive Waveguide Devices: Materials, Fabrication, and Applications. Adv. Mater. Technol. 2020, 5, 1901153.*
4. *Ermolaev, G.A. et al. Giant optical anisotropy in transition metal dichalcogenides for next-generation photonics. Nat Commun 12, 854 (2021).*

УДК 535.012.21

Поверхностные волны на границе раздела одноосного анизотропного материала и изотропного

А.А. Белов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²НИЦ Курчатовский институт – ИТЭФ

Для поверхностных волн характерна локализация энергии вблизи раздела сред, т. е. формулировка задачи состоит в отыскании плоских волн, компонента k_z которых будет иметь мнимую составляющую.

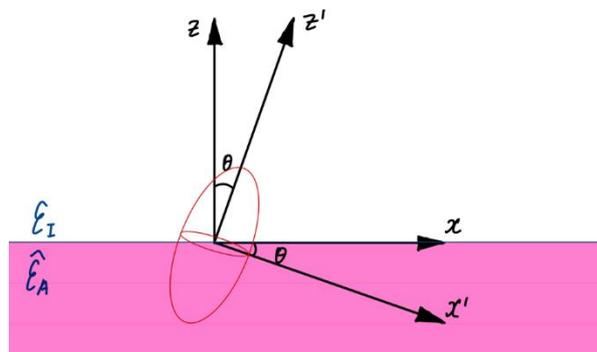


Рис. 1. Схематическое изображение взаимного расположения перпендикуляра границе раздела сред – z , и тензора диэлектрической проницаемости – овал с красным контуром

Ищем решения в виде

$$\mathbf{E} = E_0 \mathbf{e} e^{i\mathbf{kr} - i\omega t} \quad \mathbf{H} = H_0 \mathbf{h} e^{i\mathbf{kr} - i\omega t}$$

Введем следующее обозначение:

$$\begin{pmatrix} q_x \\ q_y \\ q_z \end{pmatrix} = \frac{1}{k_0} \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix}$$

Необходимо найти решения следующего уравнения

$$\frac{\omega^2}{c^2} \hat{\varepsilon} \mathbf{E} = \nabla(\nabla \mathbf{E}) - \Delta \mathbf{E}$$

для каждой из сред и применить граничные условия на непрерывность касательных составляющих векторов H и E .

Полученная функциональная зависимость связывает значения q_x и q_y между собой. Ее мы в дальнейшем будем называть *дисперсионным соотношением для поверхностных волн*. Далее дисперсионное соотношение для поверхностных волн будет анализироваться на предмет интересных эффектов и их применения.

УДК 53.06

Дипольные моменты плазмонных и диэлектрических резонансных мета-атомов

С.Р. Гузик

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Физика метаматериалов изучает искусственно созданные материалы, создаваемые путем внедрения искусственных атомов в вещество. В работе рассмотрен подход использования наноантенн в качестве мета-атомов. Предложен метод нахождения и получено значение матричного элемента дипольного момента перехода между основным и возбужденным уровнем наночастицы без его явного расчета через формализм квантовой механики, уравнение Шредингера и волновые функции. Найдены положения дипольных электрических резонансов и некоторые закономерности в их положении в зависимости от радиуса шарообразной частицы. Для этого была использована программа Wolfram Mathematica. В работе получены зависимости дипольных моментов перехода и дипольных моментов перехода, нормированных на объем частицы, для металлических и диэлектрических частиц. Показано, что величина дипольного момента такой частицы оказывается несравненно выше, чем у обычных молекул, различие может характеризоваться тремя или даже четырьмя порядками дипольного момента обычной молекулы.

Такие значения дипольных моментов перехода позволяют достигать режима сильной и ультра-сильной связи без условий высокого вакуума, криогенных температур и больших магнитных полей. Режим ультра-сильной связи имеет множество применений в физике и химии [2], таких как уменьшение фотодеградаций в полимерных соединениях, контроль кинетики реакции и др. Наночастицы в отличие от реальных молекул не подвержены деградации, а их параметры легко адаптируются под наши цели.

Литература

1. *Baranov D.G., Munkhbat B., Zhukova E., Bisht A., Canales A., Rousseaux B., Johansson G., Antosiewicz T.J., Shegai T.* Ultrastrong coupling between nanoparticle plasmons and cavity photons at ambient conditions // Nature communications, 2020.
2. *Baranov D.G., Munkhbat B., Länk N.O., Verre R., Käll M., Shegai T.* Circular dichroism mode splitting and bounds to its enhancement with cavity-plasmon-polaritons // Nanophotonics, 2020.
3. *Herzog M., Munkhbat B., Baranov D., Shegai T., Börjesson K.* Enhancing Vibrational Light-Matter Coupling Strength beyond the Molecular Concentration Limit Using Plasmonic Arrays // Nanoletters, 2020.
4. *Bohren G.F., Huffman D.R.* Absorption and Scattering of Light by Small Particles, 1940.

УДК 53.06

Исследование ультра-сильной связи между плазмонными мета-атомами и оптическим излучением

А.Ю. Нехоченинов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

С теоретической точки зрения взаимодействие электромагнитного излучения с некоторыми резонансами можно описывать как взаимодействие двух связанных между собой гармонических осцилляторов. В настоящее время проводятся различные исследования связи материи с веществом, выделяют режимы слабой связи, сильной связи (SC), ультра-сильной связи (USC) и глубокой (DSC). В большинстве случаев рассматривают падающее излучение как некоторое возмущение [3], однако этот под-

ход не всегда оказывается верным. В режиме сильной связи система должна описываться гамильтонианом Хопфильда, когда как в режиме слабой связи достаточно использовать гамильтониан Джейнса–Каммингса. При сильной связи, помещая атом в резонатор, мы можем наблюдать вакуумное расщепление Раби и появление гибридных поляритонных состояний. Важную роль при взаимодействии двух связанных между собой осцилляторов играет константа связи осцилляторов между собой. Если связь становится сильной, то мы уже не можем говорить о том, что у нас существуют два разных гармонических осциллятора. Собственные состояния характеризуются в таком случае волновыми функциями, отличными от волновых функций отдельных осцилляторов, и наблюдается появление других собственных значений гамильтониана системы, возникает антипересечение уровней, говорят, что образуются поляритоны [2]. Ультра-сильная связь допускает множество [1] интересных физических явлений, например зависимость вакуумной энергии от частоты падающего фотона.

Литература

1. *Baranov D.G., Munkhbat B., Länk N.O., Verre R., Käll M., Shegai T.* Circular dichroism mode splitting and bounds to its enhancement with cavity-plasmon-polaritons.
2. *Kockum A.F., Miranowicz A., De Liberato S., Savasta S., Nori F.* Ultrastrong coupling between light and matter.
3. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Т.3. Квантовая механика.

УДК 535.92

Кремниевая полностью диэлектрическая метаповерхность на пленке феррита-граната для магнитооптической модуляции света в ближнем ИК-диапазоне

М.П. Мандрик¹, Д.М. Кричевский^{2,3,4}, Д.О. Игнатьева^{2,4}, В.И. Белотелов^{4,5}

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского

⁴Российский квантовый центр

⁵Школа фотонных и квантовых технологий МГУ им. М.В. Ломоносова

Современные устройства для магнитооптической модуляции часто опираются на принципы традиционной магнитоплазмоники [1]. Такие структуры имеют серьезные недостатки в виде сложности изготовления и больших диссипативных эффектов. Проблема в используемых металлах: например, золото обладает большим коэффициентом поглощения на ближних ИК-частотах и требует сложных методов нанесения с использованием технологии сфокусированного ионного пучка (FIB). Однако применение только диэлектрических материалов для структур, основанных на принципах усовершенствованной магнитооптики, позволяет преодолеть эти проблемы [2].

В данной работе исследуется полностью диэлектрическая структура, представляющая из себя двумерный массив кремниевых нанодисков, расположенных на тонких пленках железо-диспрозиевого граната, активированного церием (Ce: DyIG) [3]. Использование кремния для изготовления метаповерхности в виде двумерного массива дисков в перспективе позволяет рассчитывать на потенциально широкий спектр практических применений из-за высокого развития методов изготовления кремниевых технологий и достаточно низкой себестоимости производства.

В метаповерхности наблюдается возбуждение оптических мод, которые под действием внешнего магнитного поля способны вызвать резонансное усиление поперечного магнитооптического эффекта Керра (ТМОКЕ) на несколько порядков по сравнению с пленкой Ce: DyIG [4]. Как показано на рис. 1 оптические моды, возбуждаемые на 828 нм и 985 нм, практически не зависят от угла падения и от полярного угла вращения образца относительно перпендикуляра к метаповерхности, что представляет интерес для сенсорных и модуляторных технологий [5].

В результате разработана и изготовлена полностью диэлектрическая кремниевая структура на основе железо-диспрозиевого граната, активированного церием, получены оптические и магнитооптические спектры структуры, исследовано влияние управляемых ТМ-мод на величину ТМОКЕ, показана независимость наблюдаемого эффекта от полярного угла вращения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России, грант Мегагрант № N075-15-2019-1934.

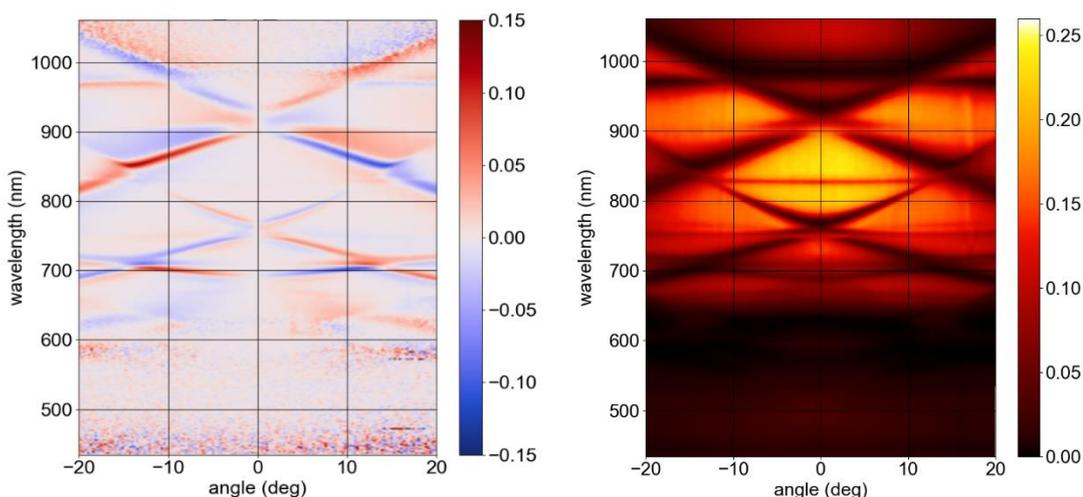


Рис. 1. Магнитооптический спектр структуры (слева), цветовой шкалой представлен ТМОКЕ и спектр пропускания (справа), цветовой шкалой представлен относительный коэффициент пропускания структуры

Литература

1. Zvezdin A.K. and Kotov V. A. Modern Magnetooptics and Magneto-optical Materials // IOP Publishing, Bristol, Philadelphia, 1997.
2. Ignatyeva D.O., Karki D., Voronov A.A., Kozhaev M.A., Krichevsky D.M., Chernov A.I., Levy M., Belotelov V. I. All-dielectric magnetic metasurface for advanced light control in dual polarizations combined with high-Q resonances // Nat. Commun. 2020, 11.
3. Zhanz Yan et al. Dysprosium substituted Ce: YIG thin films with perpendicular magnetic anisotropy for silicon integrated optical isolator applications // APL Materials 7, 8.
4. Mandrik M.P., Ignatyeva D.O., Krichevsky D.M., Belotelov V. I., Xia S., Bi L. Silicon-Based All-Dielectric Metasurface on an Iron Garnet Film for Efficient Magneto-Optical Light Modulation in Near IR Range // Nanomaterials 2021, 11, 2926.
5. Kim I., Kim W.S., Kim K., Ansari M.A., Mehmood M.Q., Badloe T., Kim Y., Gwak J., Lee H., Kim Y.K., et al. Holographic metasurface gas sensors for instantaneous visual alarms // Sci. Adv. 2021, 7.

УДК 53

Оптические свойства полупроводниковых композитов

В.П. Соловей

Центр фотоники и двумерных материалов МФТИ НИУ

Одними из наиболее перспективных двумерных материалов для оптоэлектронных и нанофотонных устройств являются коллоидные полупроводниковые нанокристаллы, двумерные материалы на основе графена и углеродных нанотрубок, халькогениды и дихалькогениды переходных металлов, а также различные металлооксидные соединения [1–4].

В данной работе были изучены оптические свойства полупроводниковых двумерных нанокристаллов теллурида кадмия (см. на вставке рис. 1 (а) – микрофотография и схематическое изображение нанопластин CdTe) в структуре полимерного диэлектрического композита при воздействии внешнего электрического поля [5]. Композит с нанокристаллами был заключен между прозрачными проводящими обкладками устройства–аналога органического светодиода. При воздействии внешнего электрического поля происходит падение интегральной интенсивности фотолюминесценции нанокристаллов CdTe на 15% (0–90 кВ/см) с последующим восстановлением интенсивности при понижении поля до 0 кВ/см (рис. 1 (а)). Наблюдался рост интенсивности относительно изначального положения на 5% при снятии внешнего воздействия. Было продемонстрировано, что влияние электрического поля на нанокристаллы является полностью обратимым, а падение интенсивности происходит в результате диссоциации экситонов, в то же время, повышение интенсивности объясняется наличием в системе остаточных зарядов после прекращения воздействия электрического поля.

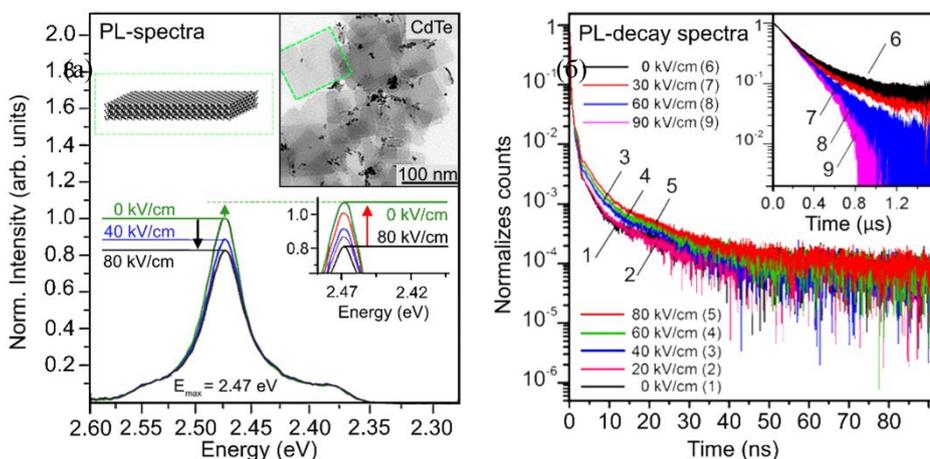


Рис. 1. (а, б) – Фотолюминесцентная (PL) спектроскопия композита с нанопластинами CdTe во внешнем электрическом поле

Была изучена релаксация фотолюминесценции нанокристаллов CdTe под действием внешнего электрического поля (рис. 1 (б)). Результаты измерений и расчетов показали, что доля фотонов, пришедших на интервале 1–40 нс, вырастет в 2 раза и падает более чем на порядок на временных интервалах 0.6–1.6 мкс (на вставке рис. 1 (б)) при достижении величины электрического поля 90 кВ/см. Таким образом, была продемонстрирована возможность управления оптическим откликом двумерных нанокристаллов CdTe. Полученные экспериментальные результаты и моделирование на их основе позволили сделать предположение о том, что внешнее электрическое поле препятствует захвату одного из носителей заряда экситона в долгоживущую (порядка нескольких микросекунд) ловушку и, как следствие, рекомбинация экситонов происходит на наносекундных временных масштабах.

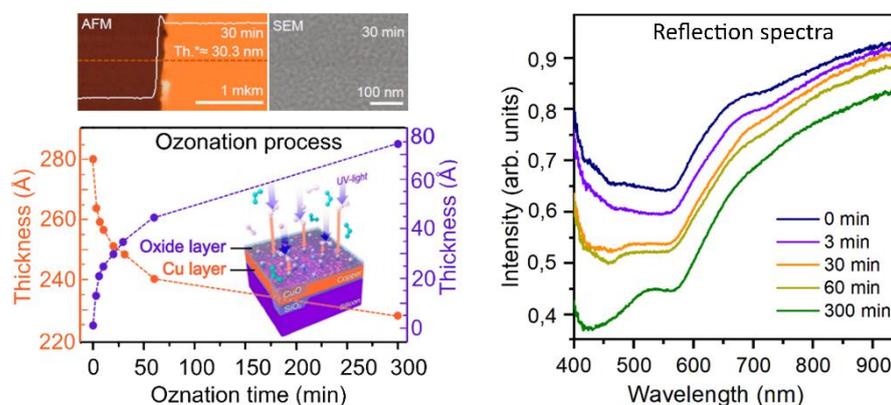


Рис. 2. (а) – AFM и SEM микроскопия; (б) – эллипсометрия и результат анализа роста оксидной пленки; (в) – спектры отражения

Были изучены оптические свойства композитов на основе полупроводниковых углеродных нанотрубок, разработанные с использованием стекловолоконной матрицы (с порами 25 мкм), пористой матрицы смешанных эфиров целлюлозы (с порами 45 мкм) и полимерной полиарилатной матрицы (с содержанием углеродных нанотрубок 0,11%, 5% и 20% масс. соответственно) [6]. Тонкие пленки на основе этих композитов, полученные с помощью методов 2D/3D печати, обладали прозрачностью 0%, 40% и 85% в видимом диапазоне (400–900 нм) при значениях поверхностного сопротивления 300 Ом/□, 400 Ом/□ и 120 Ом/□ соответственно. Толщина первых двух пленок составляла 50 мкм; толщина полиарилатной композитной пленки – 1 мкм). Пленки на основе полиарилатного композита могут применяться в качестве аналога кристаллического оксида индия-олова в прозрачной печатной электронике и при разработке органических светодиодов. Композитные пленки на пористых матрицах могут применяться для газовых сенсоров [7–10].

Впервые была продемонстрирована возможность создания защитного полупроводникового тонкого оксидного слоя CuO на поверхности медных пленок методом УФ-озонирования для приложений нанофотоники [11]. Методом электронно-лучевого испарения были получены тонкие пленки меди

толщиной 25 нм, которые подвергались УФ-обработке (рис. 1 (г)) в течение разных интервалов времени (от 0 до 300 минут). На основании данных эллипсометрии, AFM и SEM микроскопии (рис. 2 (а)), измерений спектров отражения (рис. 2 (в)), а также при помощи XPS-анализа была определена оптимальная толщина оксидного слоя CuO, полученного методом УФ-озонирования, которая составила 3–4 нм (для образца, обработанного УФ в течении 30 минут). Композитный полупроводниковый слой CuO эффективно защищает медь от окисления, а метод УФ-озонирования является простым и дешевым решением для сохранения функциональных свойств меди в приложениях нанoeлектроники, нанooптики и биосенсорике.

Литература

1. Chen Z., Nadal B., Mahler B., Aubin H., Dubertret B. // *Adv. Funct. Mat.* 24, 295–302 (2014).
2. Ithurria S., Dubertret B. // *Am J., Chem. Soc. ReV.* 130, 16504–16505 (2008).
3. Ottaviano L. et al. *2D Materials.* 4, 045013 (2017).
4. Ren Q., Feng Z., Mo S., Huang C., Li S., Zhang W., Chen L., Fu M. // *Cat. Today*, 160–167. (2019).
5. Vitukhnovsky A.G., Selyukov A.S., Solovey V. R., Vasiliev R.B., Lazareva E.P. // *Journal of Luminescence.* 186, 194–198 (2017).
6. Anoshkin I.V., Kauppinen E.I., Tolochko O.V., Nasibulin A.G. // *Carbon*, 100, 501–507. (2016).
7. Varfolomeev A.V., Solovey V. R., Volkov I.A., Maeder T. // *Orient. J. of Chem.* 34, 24–29 (2018).
8. Варфоломеев А.В., Волков И.А., Соловей В.Р., Маэдер Т., патент RU2688742 на изобретение «Газочувствительного композита и способа его изготовления», (2019).
9. Simonenko T.L., Simonenko N.P., Gorobtsov P. Yu., Vlasov I.S., Solovey V. R., Shelaev A.V., Simonenko E.P., Glumov O.V., Melnikova N.A., Kozodaev M.G., Markeev A.M., Lizunova A.A., Volkov I.A., Sevastyanov V. G., Kuznetsov N.T. // *J. of Coll. and Interf. Sci.*, 588, 209–220 (2021).
10. Simonenko T.L., Simonenko N.P., Gorobtsov P. Yu., Mokrushin A.S., Solovey V. R., Pozharnitskaya V. M., Simonenko E.P., Glumov O.V., Melnikova N.A., Lizunova A.A., Kozodaev M.G., Markeev A.M., Volkov I.A., Sevastyanov V. G., Kuznetsov N.T. // *J. of All. and ComP.*, 832, 154957 (2020).
11. Solovey V. R., Yakubovsky D.I., Ermolaev G.A., Lebedinskij Y.Y., Markeev A.M., Voronov A.A., Zamboni F., Popok V. N., Arsenin A.V., Volkov V. S. and Novikov S.M. // *Conf. proc. Metanano 2021* (2021).

УДК 538.97

Проявления нелокальной проводимости в ближнепольной микроскопии

М. Е. Хавронин¹, Д. А. Свинцов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Зависимость тока от электрического поля обычно нелокальна, что означает, что на ток в данной точке может влиять поле в удаленных местах. Эта нелокальность возникает из-за теплового или квантового движения носителей заряда. Исследования нелокальной проводимости могут пролить свет на динамику носителей заряда. Освещение образца дальнепольным излучением не дает проявиться нелокальности, так как скорость света в 10^2 раза превышает типичную скорость носителей заряда. Ближнепольная микроскопия открывает большие перспективы для изучения этого эффекта. Ранее косвенные доказательства нелокальных эффектов были получены в спектрах [1] и затухании [2] плазмонов, запускаемых иглой в графене. В нашей работе мы изучаем, как нелокальность проводимости двумерной системы влияет на интенсивность излучения, рассеянного зондом ближнепольного микроскопа

Мы предлагаем метод определения режима транспорта носителей заряда с использованием зонда с высокой чувствительностью к пространственному распределению зарядов и токов в материале. Исследуемая система представляет собой двумерный материал и ближнепольный зонд, освещаемый плоской волной. Наконечник моделируется как точечный диполь; его момент (и интенсивность излучения) зависит от локального поля, на которое влияет распределение токов в двумерном материале. Поскольку высота острия может быть меньше скорости ферми-электронов, деленной на частоту освещения, нелокальность проводимости дает большой вклад в локальное поле. В качестве возможных механизмов нелокальности рассматриваются гидродинамическая проводимость, при которой носители получают дополнительное изменение импульса от соседей из-за вязкости, и баллистическая проводимость, при которой волновые функции носителей чувствительны к полям возле соседей из-за квантовой интерференции. Мы получили, что зависимость переизлученной мощности (пропорциональной $|d|^2$, рис. 1) от высоты z_0 различна для разных режимов переноса заряда в 2d-системе. При малых z_0

найлены аналитические выражения для дипольного момента для разных режимов проводимости – для дрейфово-диффузионной (Друде), гидродинамической и баллистической проводимости.

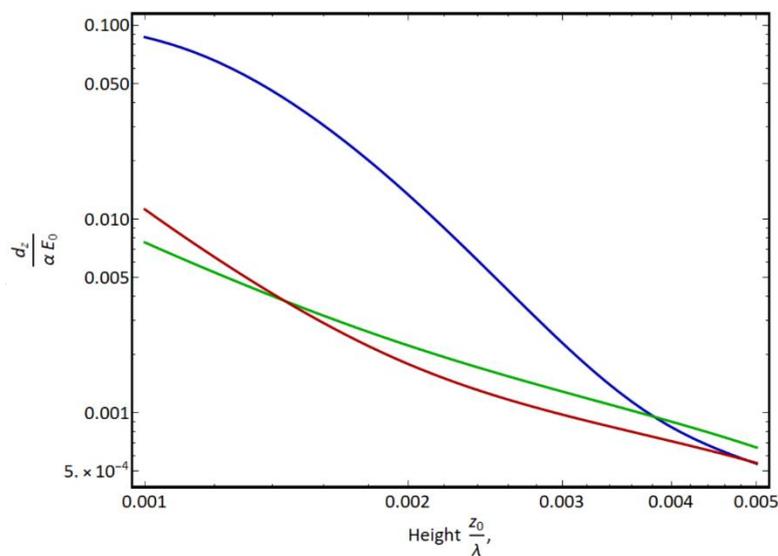


Рис. 1 Зависимость наведенного дипольного момента $d(z_0)-d(\infty)$ (нормированного на поляризуемость и внешнее электрическое поле) с вычетом от высоты острия над двумерной системой z_0 . Синяя линия соответствует проводимости Друде, зеленая – гидродинамической проводимости, красная – баллистической проводимости

Литература

1. *Lundeberg M., et al.* // Science V. 357, 187 (2017).
2. *Woessner A., et al.* // Nat. Mater. 14, 421 (2015).

Секция фундаментальных основ многомасштабного атомистического моделирования

УДК 538.9

Энергии образования точечных дефектов кубической фазы магнетита в DFT+U

М.И. Шутикова^{1,2}, В.В. Стегайлов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Построение DFT+U-модели кубической фазы магнетита и ее дефектов из первых принципов – задача, актуальная для действующих и разрабатываемых в настоящее время приложений магнетита, а также для рассмотрения таких фундаментальных проблем физики конденсированного состояния, как переход Вервея. Существующие статические *ab-initio* модели кубической фазы имеют принципиальные отличия (например, наличие или отсутствие запрещенной зоны и отличий двух- и трехвалентных катионов в кубической фазе магнетита в моделях работ [1] и [2]) и дают противоречивые данные о свойствах дефектов кубической фазы [3].

В докладе будет представлена наиболее точная, на наш взгляд, модель кубической фазы магнетита, позволяющая получать количественные характеристики ее точечных дефектов, имеющие хорошее согласие с экспериментальными данными. Будут представлены результаты DFT+U расчетов энергии образования пары Френкеля, состоящей из изолированной вакансии и изолированного междоузельного атома, в кубической фазе магнетитного оксида Fe₃O₄. Будет обсуждаться проблема локальных минимумов в рамках задачи расчета свойств дефектов в DFT+U и данные, полученные в моделях с и без дополнительной симметризации спиновой плотности. Будет проведено сравнение полученных с и без эффективной поправки Хаббарда данных с экспериментальными данными. Будет показан размерный эффект для конфигураций с дефектами и представлены результаты, полученные после проведения *ab-initio* молекулярной динамики для дефектных и бездефектных конфигураций.

Работа выполняется при поддержке РФФИ (гранты 20-21-00159, 20-32-90081).

Литература

1. Piekarczyk P. *et al.* Trimeron-phonon coupling in magnetite // *Phys. Rev. B*. 2021. V. 103, № 10. P. 104303.2. Liu H., Di Valentin C. Band Gap in Magnetite above Verwey Temperature Induced by Symmetry Breaking // *J. Phys. Chem. C*. 2017. V. 121, № 46. P. 25736–25742.
2. Шутикова М.И., Стегайлов В.В. Энергии образования вакансий кубической фазы магнетита в рамках DFT+U // *ЖЭТФ*. 2021. V. 160, № 2, P. 249–274.

УДК 538.911

Исследование процесса формирования кластеров при лазерной абляции методом молекулярной динамики

А.Н. Гостевская¹, А.В. Маркидонов^{1,2}

¹Сибирский государственный индустриальный университет

²Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета

Физика режимов абляции, свойственных лазерному облучению металлов, моделируется с помощью метода молекулярной динамики [1, 2]. Лазерная абляция, или облучение ультракороткими лазерными импульсами, имеет практический интерес, затрагивающий как экспериментальные, так и теоретические исследования [3–5]. На данный момент существуют теоретические методы, которые основываются на построении тепловых моделей [6], разборе баланса энергии испускания лазера [7], что

позволяет оценить воздействие лазерной абляции на поверхностное строение материала. В ходе литературного анализа было установлено, что метод молекулярно-динамического моделирования позволяет совместить теоретические прогнозы в области физики лазерной абляции и сопоставить их с экспериментально полученными данными.

В настоящем исследовании проводилось изучение влияния ультракоротких лазерных импульсов на изменения атомарной структуры металлов при высокотемпературном воздействии при абляции.

В качестве механизма образования кластерных частиц рассматриваются процессы конденсации облака эжектированных частиц, фазовый взрыв.

Для идентификации кластеров система частиц была разделена на отдельные группы на основе критериев расстояния. Данное расстояние равняется удвоенному значению параметра решетки. Под разными кластерами подразумевается группа частиц, каждая из которых удаляется от частиц этой группы на расстоянии, не превышающем область отсечения. После идентификации кластеров частицы они окрашиваются в определенный цвет согласно их размеру. По мере увеличения количества частиц, принадлежащих кластеру, цветовая гамма менялась с пурпурного на красный.

Для данного исследования проводилось моделирование нагрева, где сам процесс определяется возрастанием числа кластеров, представляющих собой отдельные частицы (рис. 1, а). При охлаждении число определяющихся кластеров сокращается, а размер данных кластеров возрастает, точнее, ранее эжектированные частицы соединяются в группы. Было установлено, что при изменении плотности лазерного излучения количество кластеров возрастает. На рис. 1 число определяющихся кластеров уменьшилось с 32 до 24. Так, исходя из рассмотренной модели, реализуется механизм конденсации продуктов абляции. Именно для этого механизма свойственно образование малых кластеров частиц.

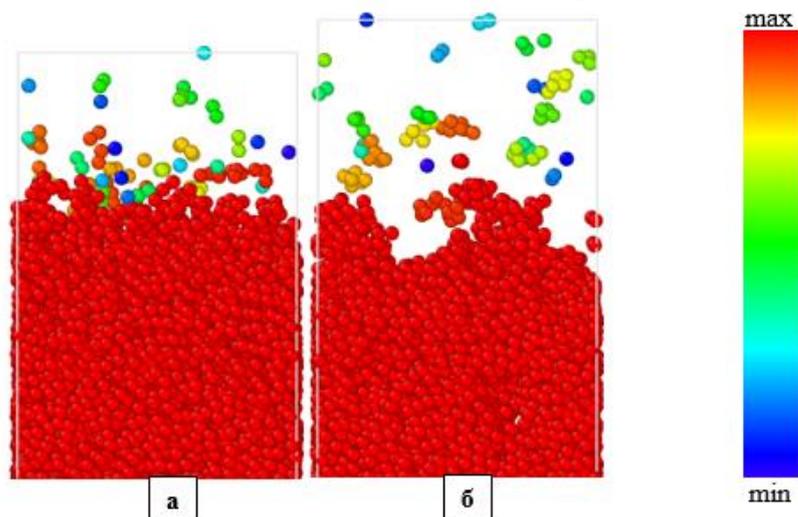


Рис. 1. Представление распознанных кластеров через 10 (а) и 18 (б) пс времени, заданного при моделировании ($q = 5 \text{ МВт/см}^2$). Цветовая визуализация соответствует размерам кластеров

Из рисунка видно, что число кластеров при увеличении давления уменьшается. Изменение их числа в процессе моделирования представлено на рис. 1.

Из выше сказанного следует, что построенная молекулярно-динамическая модель дает возможность осуществить оценку части эжектированных частиц в результате нагрева расчетной ячейки. Проведено исследование формирования кластеров частиц при абляции.

Литература

1. Гостевская А.Н. Молекулярно-динамическое моделирование лазерной абляции // Издательский центр СибГИУ. 2021. Вып. 25. Ч. I. С. 14–18.
2. Tabetah M., Matei A., Constantinescu C., Mortensen N., Dinescu M., Schou J., Zhigilei L.V. The minimum amount of «matrix» needed for matrix-assisted pulsed laser deposition of biomolecules // The Journal of Physical Chemistry B. 2014. V. 118. P. 13290–13299.
3. Song C., Lin T., He P., Zhen J. Molecular dynamics simulation of linear friction welding between dissimilar Ti-based alloys // Computational Materials Science. 2014. V. 83. P. 35–38.
4. Anisimov S.I., Luk'yanchuk B.S. Selected problems of laser ablation theory // Physics-Uspekhi. 2007. V. 45. P. 293. Bauerle D. Laser Processing and Chemistry // Luxembourg: springer science business media, 2011. 851 P.
5. Willis D.A., Grosu V. The effect of melting-induced volumetric expansion on initiation of laser-induced forward transfer // Applied Surface Science. 2007. V. 253, № 10. P. 4759–4763.

6. *Fardel R., Nagel M., Nuesch F.* Energy Balance in a Laser-Induced Forward Transfer Process Studied by Shadowgraphy // *Journal of Physical Chemistry C*. 2009. V. 113. P. 11628–11633.

УДК 533.9.01

Исследование устойчивости цепочечных структур пылевых частиц в плазме с конденсированной дисперсной фазой

Д.А. Колотинский^{1,2}, А.В. Тимофеев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Пылевая плазма, или плазма с конденсированной дисперсной фазой, представляет собой слабо ионизированный газ, в котором содержатся частицы конденсированного состояния микронных и субмикронных размеров. Такие частицы, находясь в плазменном окружении, заряжаются отрицательно в силу разности в подвижностях ионной и электронной компонент плазмы. Пылевая плазма наблюдается в космическом пространстве, в хвостах комет и в кольцах планет, также она активно исследуется в лабораториях. Интерес к изучению пылевой плазмы обусловлен как необычностью наблюдаемых в ней явлений – самоорганизация пылевых частиц в сложные упорядоченные структуры, перекачка энергии из плазменной подсистемы в энергию пылевых частиц – так и практическое применение пылевой плазмы. Так, в методе напыления поверхностей в высоком электрическом поле генерируется пылевая плазма, пылевые частицы в которой представляют собой капельки наносимого на поверхность покрытия.

Образование цепочечных пылевых структур экспериментально наблюдалось в большом количестве экспериментов, включая эксперименты на международной космической станции [1, 2]. В условиях микрогравитации формирование пылевых цепочечных структур связывают с эффектом, аналогичным электрореологическому в жидкостях [3]. Для экспериментального исследования цепочечных структур в плазме с КДФ в условиях земной гравитации, пылевые частицы инжектируются в область плазмы газового разряда, ограниченную специальной стеклянной коробкой [4, 5]. В этом случае формирование цепочечных структур объясняется наличием горизонтального конфайнмента из-за присутствия стеклянной коробки и кильватерным следом [6]. В [4, 5] экспериментально исследовался вопрос об устойчивости цепочечных структур пылевых частиц от мощности газового разряда.

В данной работе исследуется условие устойчивости цепочечных структур пылевых частиц в газоразрядной плазме. Исследование проводится с использованием разрабатываемого автором программного пакета «Open Ionwake», предназначенного для согласованного моделирования динамики плазменной и пылевой подсистем плазмы с конденсированной дисперсной фазы. В результате работы теоретически рассчитываются параметры плазменно-пылевой системы, при которых цепочечная структура пылевых частиц становится неустойчивой. Результаты данной работы могут быть в дальнейшем использованы при постановки экспериментов и для уточнения описания свойств плазменно-пылевой системы.

Литература

1. *Ivlev A.V. et al.* Complex plasmas in external fields: The role of non-Hamiltonian interactions // *Physical review letters*. 2011. V. 106, N 15. P. 155001.
2. *Arp O., Goree J., Piel A.* Particle chains in a dilute dusty plasma with subsonic ion flow // *Physical Review E*. 2012. V. 85, N 4. P. 046409.
3. *Ivlev A.V. et al.* First observation of electrorheological plasmas // *Physical review letters*. 2008. T. 100, N 9. C. 095003.
4. *Kong J. et al.* Interaction force in a vertical dust chain inside a glass box // *Physical Review E*. 2014. V. 90, N 1. P. 013107.
5. *Kong J. et al.* One-dimensional vertical dust strings in a glass box // *Physical Review E*. 2011. T. 84, N 1. P. 016411.
6. *Hutchinson I.H.* Nonlinear collisionless plasma wakes of small particles // *Physics of Plasmas*. 2011. V. 18, N 3. P. 032111.

Вклады в коллективные движения атомов в кристаллах

В.Д. Негодин

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

В работах [1, 2] вводится и изучается четырёхточечный двухчастичный корреляционный коэффициент в расплаве и в кристалле металлов. Проведено [3] исследование введённого коррелятора для модельной системы частиц с леннард-джонсовским потенциалом взаимодействия. Обнаружен излом коррелятора при переходе из стабильной жидкости в перегретую в точке фазового перехода. Для дальнейшего изучения коллективных движений атомов в кристаллах будут исследованы распределения значений коррелятора, зарегистрированных в процессе моделирования системы.

Корреляционный коэффициент вычисляется по формуле

$$CC(T, R, \tau) = \left\langle \frac{[\vec{r}_i(t+\tau) - \vec{r}_i(t)] \cdot [\vec{r}_k(t+\tau) - \vec{r}_k(t)]}{|\vec{r}_i(t+\tau) - \vec{r}_i(t)| \cdot |\vec{r}_k(t+\tau) - \vec{r}_k(t)|} \right\rangle_t = \langle \cos \varphi(t) \rangle_t,$$

где $\vec{r}_i(t)$, $\vec{r}_k(t)$ – радиус-векторы частиц i и k , находящихся на расстоянии $R \pm \delta$ в начальный момент времени t . Угловые скобки $\langle K \rangle_t$ означают набор статистики значений по всем парам частиц, удовлетворяющим условию начального расстояния между ними, и по всем конфигурациям системы. Зависимость коррелятора от температуры неявная. Значения коррелятора трактуются как мера согласованности движения частиц.

Везде далее рассматривается величина $N_{CC} = \langle CC \rangle_t / (N_{\text{particle}} \cdot N_{\text{conf}})$, являющаяся нормированным на число частиц и число начальных конфигураций системы количеством регистраций тех или иных значений CC .

Построена гистограмма значений величины N_{CC} для всех температур системы, результаты представлены на рис. 1. Наблюдается сильная анизотропия значений – значения столбцов около $CC = 1$ значительно выше остальных, что показывает высокую коллективность движения атомов в кристаллах. Чёрным цветом показана экстраполяция значений каждого из столбцов гистограммы к температуре $T = 0$. Эта линия отражает первый вклад в коллективные движения атомов: анизотропный, не зависящий от температуры, связанный с фоновыми колебаниями.

На рис. 2 показана разность экстраполированной гистограммы и гистограмм для конечных температур: $\Delta(T) = \text{hist}(\lim T = 0) - \text{hist}(T)$. Полученные разницы $\Delta(T)$ отражают второй вклад в коллективные движения частиц: практически изотропный, зависящий от температуры, связанный, по-видимому, с ангармонизмом потенциала взаимодействия и неидеальностями кристаллической решётки и наличия дефектов.

Температурная зависимость разности гистограмм $\Delta(T)$ имеет больцмановскую зависимость (рис. 3), что показывает обоснованность и самосогласованность выделения второго вклада именно в такой форме. На рис. 4 изображены значения энергий, найденных из больцмановской зависимости столбцов гистограммы от температуры. Наблюдаются практически постоянные значения.

Таким образом, выделено два вклада в коллективные движения частиц в кристаллах: первый, не зависящий от температуры, анизотропный, связанный с фононами, и второй, практически изотропный, зависящий от температуры по больцмановскому закону, связанный с ангармонизмом потенциала взаимодействия и дефектами в кристалле. Установлена самосогласованность выделения второго вклада, вычислена энергия возбуждений, связанных с этим вкладом.

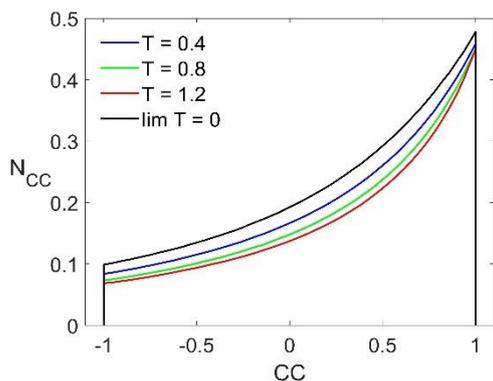


Рис. 1. Гистограммы значений корреляционного коэффициента CC для трёх температур системы. Чёрным цветом - экстраполированная к $T = 0$ гистограмма. Плотность $\rho = 1.0$

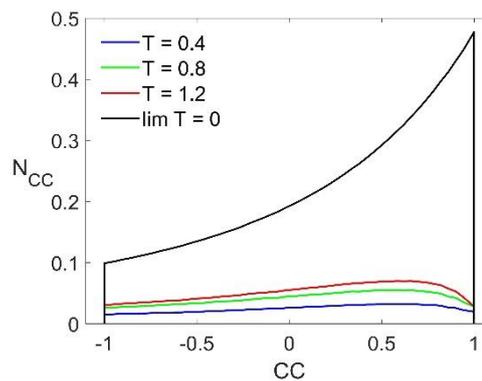


Рис. 2. Поточечные разности этой гистограммы и гистограмм для конечных значений T и экстраполированная к $T = 0$ гистограмма. Плотность $\rho = 1.0$

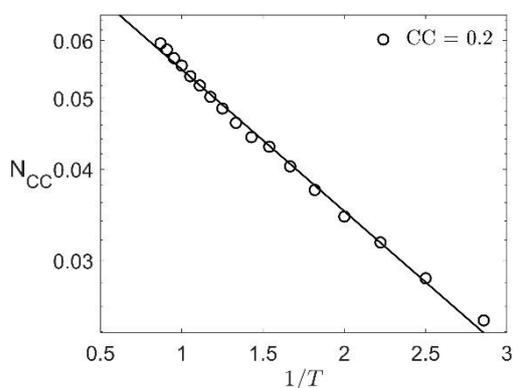


Рис. 3. Типичная температурная зависимость $\Delta(T)$ для столбца $CC = 0.2$ в аррениусовых координатах и интерполирующая прямая по точкам

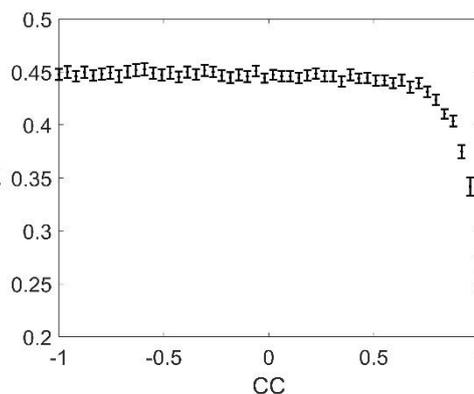


Рис. 4. Энергии возбуждений, найденные из наклона температурной зависимости столбцов $\Delta(T)$ для всех значений коррелятора CC . Отмечены погрешности найденных значений энергии как погрешности проведения интерполирующих прямых

Литература

1. *Норман Г.Э., Флейта Д.Ю.* Коллективные движения атомов в перегретом кристалле и переохлажденном расплаве простого металла // Письма в ЖЭТФ. 2020. Т. 111(4). С. 251.
2. *Норман Г.Э., Писарев В.В., Флейта Д.Ю.* Особенность в точке перехода от равновесной к метастабильной фазе металлического расплава // Письма в ЖЭТФ. 2019. Т. 109(10). С. 689.
3. *Negodin V., Polyachenko Y., Fleita D., Pisarev V., Norman G.* Kinetic singularities at transition points from equilibrium to metastable states of the Lennard-Jones particle system // J. Mol. Liq. 2021. V. 322. P. 114954.

УДК 539

Неравновесные переходы между аморфными формами льда и расчет их модулей упругости: молекулярно-динамическое моделирование

А.А. Гаркуль^{1,2}, В.В. Стегайлов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Вода проявляет множество аномальных свойств, среди которых наличие нескольких аморфных состояний. Наиболее распространенные из них – аморфный лед низкой (LDA) и высокой (HDA) плотности.

В отличие от обычных фазовых переходов первого рода кинетика переходов кристалл-аморфная форма и аморфная-аморфная форма изучена гораздо меньше. Для микроскопического понимания

того, как проходят подобные превращения, эффективным теоретическим инструментом является метод молекулярной динамики (МД). В данной работе рассматриваются неравновесные превращения между HDA и LDA, индуцированные давлением и нагревом, в которых, в отличие от термодинамически равновесных процессов конечная фаза может зависеть от кинетического пути время–давление–температура, и свойства аморфных веществ могут зависеть от процесса их приготовления, поэтому имеет место влияние скоростей сжатия/декомпрессии и охлаждения/нагрева на особенности рассматриваемых систем. Также выполнена проверка наличия размерного эффекта.

В рамках метода МД мы напрямую [2] рассчитываем модули упругости аморфных льдов в рассматриваемых процессах, для того, чтобы составить микроскопическое представление о тесной связи между упругими свойствами и природой динамического беспорядка, присутствующего в аморфных льдах, а также раскрыть особенности температурной и барической зависимостей упругих характеристик [1].

Рассматривается модель воды TIP4P/Ice [3] для систем из 2880, 23040 и 77760 молекул в кубическом ящике с периодически-граничными условиями. Моделирование системы и расчеты реализованы с использованием пакета LAMMPS.

Литература

1. Gromnitskaya E., Stal'gorova O., Brazhkin V., Lyapin A. Ultrasonic study of the nonequilibrium pressure-temperature-diagram of ice // Phys. Rev. B64, 094205 (2001).
2. Mehl M.J. Pressure dependence of the elastic moduli in aluminum-rich Al-Li compounds // Phys. Rev. B47, 2493 (1993).
3. Abascal J., Sanz E., García Fernández R., Vega C. A potential model for the study of ices and amorphous water: Tip4p/ice // The J. Chemical Physics 122, 234511 (2005).

УДК 57.012.7

Количественная оценка характера распределения белок-липидных контактов в трансмембранных сегментах рецепторных тиразинкиназ человека

П.Е. Попов¹, А.С. Кузнецов^{1,2,3}, Р.Г. Ефремов^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

³Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Рецепторные тиразинкиназы (РТК) представляют собой мембранные белки, выполняющие рецепторную функцию и состоящие из внутриклеточного киназного домена, участвующего в фосфорилировании субстратов, трансмембранного (ТМ) сегмента и внеклеточного домена, связывающегося с лигандами: гормонами, цитокинами и полипептидными факторами роста [1]. У человека насчитывается 20 семейств различных РТК [2], многие из которых недостаточно изучены. Для РТК характерно образование димеров как в активном, так и в неактивном состоянии рецепторов, при этом ТМ-домен участвует в димеризации и передаче сигнала [3–7]. Этот домен представляет собой альфа-спираль длиной 25–38 аминокислотных остатков. В случае формирования димера конформация ТМ-участка определяет состояние рецептора. При этом немаловажную роль играет липидное окружение – оно формирует неоднородности в мембране вблизи ТМ-доменов белка, которые, в свою очередь могут стабилизировать/дестабилизировать определённые конформации димеров [8–10].

Отдельным важным вопросом является влияние точечных мутаций на структуру и функционирование РТК [11]. Известно, что такие замены могут приводить к различным заболеваниям. В частности, мутации в ТМ-доме могут препятствовать формированию корректной структуры димера ТМ-домена, приводя, например, к его активации в отсутствие лиганда. Таким образом, изучение влияния точечных мутаций на поведение ТМ-сегментов в мембранном окружении – важный вопрос для понимания молекулярных основ широкого спектра социально значимых заболеваний.

Целью настоящей работы является создание математической модели для оценки влияния отдельных аминокислот в ТМ-сегментах РТК и искусственных полипептидах на пространственное распределение связанных липидов вблизи мономерных ТМ-спиралей белков на основе анализа двумерных карт распределений плотности, полученных в результате усреднения по молекулярно-динамическим траекториям. В дальнейшем планируется расширить модель для учёта белок-белковых взаимодействий в димерных состояниях РТК, что позволит предсказывать эффекты мутаций без необходи-

мости проведения длительных расчётов молекулярной динамики. Создание такого инструмента анализа позволит оптимизировать проведение компьютерных экспериментов за счёт сокращения числа расчётов траекторий полноатомной молекулярной динамики для последовательностей ТМ-пептидов – путём выбора наиболее перспективных мутантных форм с помощью ранжирования.

Работа поддержана грантом РФФ 18-14-00375

Литература

1. *Berger O., Edholm O., Jähnig F.*, *Biophys. J.*, 72(5), 2002–2013, (1997).
2. *Robinson D.R., Wu Y.M., Lin S.F.* The protein tyrosine kinase family of the human genome // *Oncogene* 2000; 19:5548–57.
3. *Cymer F., Veerappan A., Schneider D.* Transmembrane helix–helix interactions are modulated by the sequence context and by lipid bilayer properties // *Biochimica et Biophysica Acta* 1818 (2012).
4. *Lemmon, M.A., Schlessinger J.* Cell signaling by receptor-tyrosine kinases // *Cell*. 2010. V. 141. N 7. P. 1117–1134.
5. *Ullrich A., Schlessinger J.* Signal transduction by receptors with tyrosine kinase activity // *Cell*. 1990. V. 61. N 2. P. 203–212.
6. *Deyev, I.E., Sohet F., Vassilenko K.P., Serova O.V., Popova N.V., Zozulya S.A., Burova E.B., Houillier P., Rzhnevsky D.I., Berchatova A.A., Murashev A.N., Chugunov A.O., Efremov R.G., Nikol'sky N.N., Bertelli E., Eladari D., Petrenko A.G.* Insulin receptor-related receptor as an extracellular alkali sensor // *Cell Metabolism*. 2011. V. 13. N 6. P. 679–689.
7. *Ullrich A., Bell J.R., Chen E.Y., Herrera R., Petruzzelli L.M., Dull T.J., Gray A., Coussens L., Liao Y.C., Tsubokawa M.* Human insulin receptor and its relationship to the tyrosine kinase family of oncogenes // *Nature*. 1985. V. 313. N 6005. P. 756–761.
8. *Kuznetsov A.S., Polyansky A.A., Fleck M., Volynsky P. E., Efremov R.G.* Adaptable Lipid Matrix Promotes Protein–Protein Association in Membranes // *Journal of Chemical Theory and Computation*
9. *Killian, J.A.* Hydrophobic mismatch between proteins and lipids in membranes // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Reviews on Biomembranes*. 1998. V. 1376. N 3. P. 401–416.
10. *Cybulski, L.E., de Mendoza D.* Bilayer hydrophobic thickness and integral membrane protein function // *Current Protein & Peptide Science*. 2011. V. 12. N 8. P. 760–766.
11. *Cuthbertson J.M., Bond P. J., Sansom M.S.P* // *Biochemistry*. 2006. V. 45. N 48. P. 14298–14310.

УДК 577.22

Структурно-динамические параметры пептидов-модуляторов активности нейраминидазы-1

Я.И. Заварзина¹, А.С. Кузнецов^{1,2,3}, Р.Г. Ефремов^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

³Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Сиалидазы или нейраминидазы (NEU) – белки из семейства экзогликозидаз, существующие у разных групп организмов. Нейраминидаза-1 человека (NEU-1) – лизосомальная сиалидаза, но существует также мембрано-связанная форма этого белка в составе комплекса рецептора эластана (ERC) [1]. В NEU-1 выявлены два потенциальных трансмембранных спиральных сегмента (остатки 139-159 и 316-333 – ТМ1 и ТМ2 соответственно) [2]. Считается, что гомодимеризация ТМ2 сегмента NEU-1 играет важную роль в работе ERC и в развитии атеросклероза [2]. Для терапии состояний аномальной активности NEU-1 при развитии атеросклероза предложено создать трансмембранный пептид-перехватчик, связывающий ТМ2-домен NEU-1 в мембране. Вопреки растущему интересу научного сообщества к нейраминидазе-1, ее мембранная организация в ERC неясна, а структурные и биохимические свойства комплекса сложно определить экспериментально. В то же время для исследования мембранных белков, и в особенности трансмембранных сегментов успешно применяется молекулярное моделирование [3, 4]. Цель настоящей работы – предсказание пространственной структуры возможных димерных состояний ТМ-доменов NEU-1 с участием потенциальных пептидов-перехватчиков. В качестве кандидатов на роль перехватчика рассматривали модификации изолированного природного ТМ-2, полученные путем внесения одиночных мутаций. Возможные димерные конформации предсказывали с помощью программы PREDDIMER, затем проводили оценку стабильности димера в липидном

бислое из дипальмитоилфосфатидилхолина путем расчета молекулярной динамики системы с использованием программного пакета GROMACS. Также рассматривали более тонкую мембрану из димиристоилфосфатидилхолина. В результате выявили три наиболее перспективных варианта последовательности пептида-перехватчика и оценили стабильность формируемых ими комплексов с TM2 NEU-1. Полученные результаты планируется использовать в качестве основы для разработки новой стратегии лечения атеросклероза за счет использования пептидов-перехватчиков, модулирующих работу NEU-1 в составе ERC.

Литература

1. Lukong K.E. et al. Intracellular distribution of lysosomal sialidase is controlled by the internalization signal in its cytoplasmic tail // J Biol Chem. 2001. V. 276. P. 81.
2. Maurice P. et al. New Insights into Molecular Organization of Human Neuraminidase-1: Transmembrane Topology and Dimerization Ability // Sci ReP. 2016. V. 6. 38363.
3. Domanski M.J. et al. Time Course of LDL Cholesterol Exposure and Cardiovascular Disease Event Risk // J Am Coll Cardiol. 2020. V. 76. P. 1507.
4. Psachoulia E. et al. Molecular dynamics simulations of the dimerization of transmembrane alpha-helices // Acc Chem Res. 2010. V. 43. P. 96.

УДК 538.9

Вычисление химических потенциалов разреженной фазы двухкомпонентной системы на примере FeO

Н.А. Фоминых, В.В. Стегайлов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Объединённый институт высоких температур РАН

Расчёт химических потенциалов является практически важной задачей, связанной, например, с фазовым равновесием или с энергиями образования дефектов. В данной статье будет рассмотрен метод расчёта химического потенциала с помощью термодинамического интегрирования выражения:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \lambda} \right)_{NVT} = \left\langle \frac{\partial U(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle \quad (1)$$

где F – свободная энергия Гельмгольца, U – потенциальная энергия, λ – параметр переключения системы в интересующее состояние, в нашем случае выключения взаимодействия одного атома.

Сначала рассматривается данный метод в рамках однокомпонентной леннард-джонсовской системы с известными уравнениями состояния [1], далее методика обобщается для двухкомпонентной разреженной системы FeO с межатомным взаимодействием, задаваемым потенциалом Терсоффа [2].

Химические потенциалы для двухкомпонентной системы будут сопоставлены с энергиями образования дефектов в плёнке вюстита FeO, находящейся в равновесии с некоторой разреженной газовой фазой. Так как на примере вакансии энергия образования дефекта E_f^V может быть выражена и определена методом молекулярной динамики [3] через равновесную концентрацию дефектов c_V , может быть выражена как:

$$c_V : \exp(-E_f^V / kT) \quad (2)$$

В то же время энергия образования вакансии может быть определена методом молекулярной статистики. В этом подходе в приближении сверхячеек E_f^V определяется по формуле:

$$E_f^V = E_V - E_0 + \mu \quad (3)$$

где E_V и E_0 – полная энергия дефектной и бездефектной конфигураций соответственно, а μ – соответствующий химический потенциал атома.

В работе анализируется согласие результатов расчета энергий образований дефектов по концентрациям дефектов и результатов расчетов химического потенциала методом термодинамического интегрирования.

Литература

1. *Johnson K. et al.* The Lennard-Jones equation of state revisited // *Molecular Physics* 1993. V. 78.
2. *Byggmästar J. et al.* Analytical interatomic bond-order potential for simulations of oxygen defects in iron // *J. Phys. Condens. Matter*. 2019. V. 31, № 21. P. 215401.
3. *Smirnov G.S., Stegailov V. V.* Formation free energies of point defects and thermal expansion of bcc U and Mo // *J. Phys. Condens. Matter*. 2019. V. 31, № 23. P. 235704.

УДК 577.352.332.

Консервативный остаток пролина в трансмембранных доменах рецепторов семейства IR: оценка структурной и функциональной роли по данным атомистического моделирования

А.Р. Идиятуллина¹, А.С. Кузнецов^{1,2}, Я.В. Бершадский², Р.Г. Ефремов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

Рецепторные тирозинкиназы – это мембранные белки, осуществляющие передачу сигналов через клеточную мембрану и таким образом регулирующие жизнедеятельность клетки. В семейство рецептора инсулина (IR) входят три белка: сам рецептор инсулина, рецептор инсулиноподобного фактора роста 1 (IGF-1R) и рецептор, подобный рецептору инсулина (IRR). IR отвечает за регуляцию гомеостаза глюкозы, IGF-1R – за рост и развитие организма, а IRR – за регуляцию щелочного баланса. Механизм активации этих рецепторов до сих пор не до конца изучен. Известно, что трансмембранный (ТМ) домен играет ключевую роль, но не ясно, как именно происходит димеризация ТМ-сегментов. Понимание механизма активации может помочь в создании высокоэффективных модуляторов активности IR, что необходимо, в частности, для терапии сахарного диабета.

При исследовании ТМ-доменов IR и IRR в лаборатории ЯМР-спектроскопии ИБХ РАН были получены первые данные, указывающие на важную структурную роль консервативного остатка пролина, однако молекулярные аспекты его влияния на поведение белков семейства IR в мембране пока неясны. Целью настоящей работы стало сравнение структурно-динамических параметров мономеров ТМ-доменов IR, IGF-1R и IRR в явно заданных липидных бислоях с помощью методов молекулярной динамики. Структурные данные, полученные методом ЯМР в мицеллах, легли в основу построенных полноатомных моделей ТМ-сегментов в мембране, после чего с помощью методов молекулярной динамики оценивали структурно-динамические параметры белков, обращая особое внимание на участок с остатком пролина. Рассматривали два липидных бислоя: из дипальмитоилфосфатидилхолина (ДПФХ) и димиристоилфосфатидилхолина (ДМФХ).

Показали, что конформации ТМ-доменов, наблюдаемые для IR, IGF-1R и IRR в мицеллах, сохраняются и при моделировании в липидном бислое. При этом остаток пролина обеспечивает повышенную подвижность N-концевого фрагмента пептидов, что особенно характерно для рецепторов IR и IRR. Изменение толщины мембраны также влияет на поведение пептидов: для IR и IRR излом альфа-спирали в области пролина стабилизируется в более тонком ДМФХ, тогда как для IGF-1R в ДМФХ наблюдали наклон оси спирального сегмента относительно нормали к плоскости мембраны.

В дальнейшем на основе полученных структурных данных планируется осуществить поиск возможных активирующих мутаций и рассмотреть процесс димеризации ТМ-доменов в липидном окружении с целью создания пептидных модуляторов активности IR и IRR.

Работа поддержана грантом РФФИ 18-14-00375.

Литература

1. *Kuznetsov A., Zamaletdinov M., Bershatsky Y., Urban A., Bocharova O. V., Bennasroune A., Maurice P., Bocharov E.V., Efremov R.* Dimeric states of transmembrane domains of insulin and IGF-1R receptors: Structures and possible role in activation // *Biochimica et Biophysica Acta – Biomembranes*. 2020. V. 1862. N 11. P. 183417.

Предсказание возможных димерных состояний трансмембранных сегментов рецептора DDR1 с помощью методов атомистического моделирования

Е.А. Козлов¹, А.С. Кузнецов^{1,2,3}, Р.Г. Ефремов^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт биоорганической химии им. академиком М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

³Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

DDR1 – мембранный белок из семейства рецепторных тирозинкиназ (РТК), активируемый коллагеном и участвующий в росте, развитии, дифференцировке и распространении клеток. Нарушение функционирования DDR1 может приводить к развитию фиброза, артрита и рака.

DDR1 состоит из трех структурных доменов: внеклеточного, отвечающего за связывание с коллагеном; внутриклеточного, обеспечивающего фосфорилирование остатков тирозина; и трансмембранного (ТМ), способствующего передаче сигнала через мембрану [1, 2]. Все указанные домены участвуют в образовании димерных и олигомерных форм DDR1. Пространственная структура ТМ-домена DDR1 неизвестна, что затрудняет исследование механизма активации рецептора и поиска эффективных методов воздействия на него. В связи со сложностью изучения структур мембранных белков экспериментальными методами для предсказания структуры димера ТМ-домена DDR1 использовали методы компьютерного моделирования.

Данная работа направлена на изучение структуры димера ТМ-домена DDR1, выявление ключевых аминокислотных остатков, стабилизирующих активное состояние, и поиск возможных пептидов-перехватчиков, способных связываться с ТМ-доменами DDR1 в клеточной мембране.

В ходе анализа литературных данных отметили предположение, что активация рецептора DDR1 может происходить путем гетеродимеризации с другими РТК и/или при смене мембранного окружения [1, 3]. Кроме того, выявили сходство DDR1 с рецепторами из подсемейства ErbB (HER), также способными образовывать активные гетеродимеры, для которых ранее были получены экспериментальные структуры. Это открывает потенциальные возможности для моделирования структуры и свойств ТМ-димеров DDR1 по гомологии с представителями ErbB.

Для получения предварительных структур димеров ТМ-сегментов DDR1 был использован веб-сервис PredDimer, а для оценки стабильности моделей в мембранном окружении – метод молекулярной динамики, реализованный в программном пакете GROMACS. Были отмечены характерные интерфейсы димеризации, позволяющие предположить способы образования олигомерных форм DDR1 за счёт гидрофильного гликофорин-подобного интерфейса, либо протяжённого гидрофобного паттерна на поверхности ТМ-спиралей. Это позволяет говорить о возможности существования ансамбля различных состояний ТМ-сегментов, соответствующих активным и неактивным состояниям рецептора DDR1. В дальнейшем планируется провести оценку свободной энергии димеризации димеров для выбора их наиболее вероятных конформаций в мембране.

Полученная информация о структурах ТМ-домена DDR1 улучшит наше понимание механизмов активации рецептора DDR1 и ляжет в основу создания новых способов воздействия на него в мембране при патологиях.

Работа поддержана грантом РФФИ 18-14-00375.

Литература

1. *Carafoli F., Hohenester E.* Collagen recognition and transmembrane signalling by discoidin domain receptors // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Proteins and Proteomics*. 2013. V. 1834. P. 2187–2194.
2. *Mihai C., Chotani M., Elton T.S., Agarwal G.* Mapping of DDR1 Distribution and Oligomerization on the Cell Surface by FRET Microscopy // *Journal of Molecular Biology*. 2009. V. 385. P. 432–445.
3. *Agarwal G., Smith A.W., Jones B.* Discoidin Domain Receptors: micro insights into macro assemblies // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Molecular Cell Research*. 2019. V. 1866. 118496.

Движение краевой дислокации и малоугловых симметричных границ зерен наклона (110) в ГЦК-металлах и Al-Cu сплавах

Е.В. Фомин¹, А.Е. Майер^{1,2}, В.С. Красников^{1,2}

¹Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

²Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

Многомасштабное исследование механизмов деформации металлов и сплавов при различных внешних нагрузках, а также разработка промежуточных теоретических моделей пластичности позволяют предлагать модели вещества для моделирования конструкционных изделий, которые учитывают внутренние механизмы пластической деформации [1]. В исследовании рассматривается движение краевой дислокации и малоугловых границ зерен (ГЗ) наклона в чистых алюминии, никеле, меди; твердом растворе атомов меди в алюминиевой матрице и в алюминий-медном сплаве упрочненного наноразмерными медными кластерами [2].

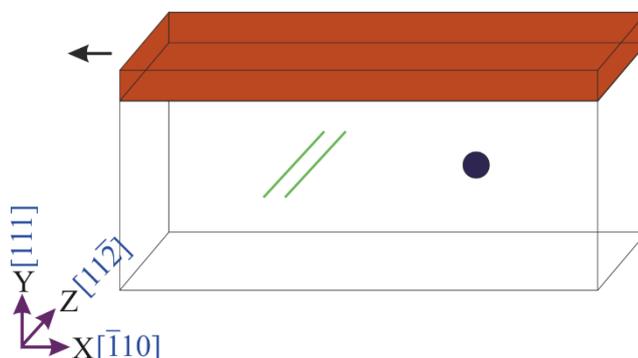


Рис. 1. Схема МД-моделирования сдвиговой деформации кристалла алюминия с наноразмерным кластером меди и краевой дислокацией: синий кружок - кластер меди; две зеленые линии – частичные дислокации Шокли; красный параллелепипед - часть кристалла, которая движется с постоянной скоростью в направлении, указанной стрелкой

Исследование движения одиночных дислокаций и малоугловой ГЗ наклона проводится с помощью метода классической молекулярной динамики (МД) в программном пакете LAMMPS [3] с потенциалами EAM [4–6] для чистых ГЦК-металлов и ADP [7] для алюминий-медных систем. Пример МД-системы с дислокацией и наноразмерным медным кластером приведен на рис. 1.

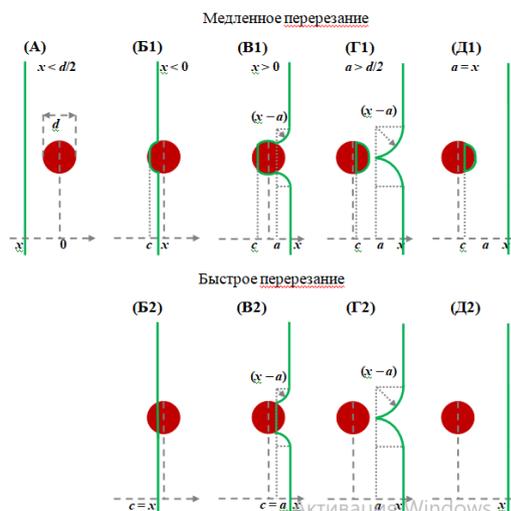


Рис. 2. Схема теоретической модели взаимодействия с медным кластером: стадия (А) приближение дислокации к кластеру; стадия (Б) – начало взаимодействия дислокации с кластером; стадия (В) – завершающая стадия взаимодействия; этап (Г) – стягивание к прямолинейной части дислокации её отстающих круговых сегментов после взаимодействия; стадия (Д) – движение прямой дислокационной линии после взаимодействия

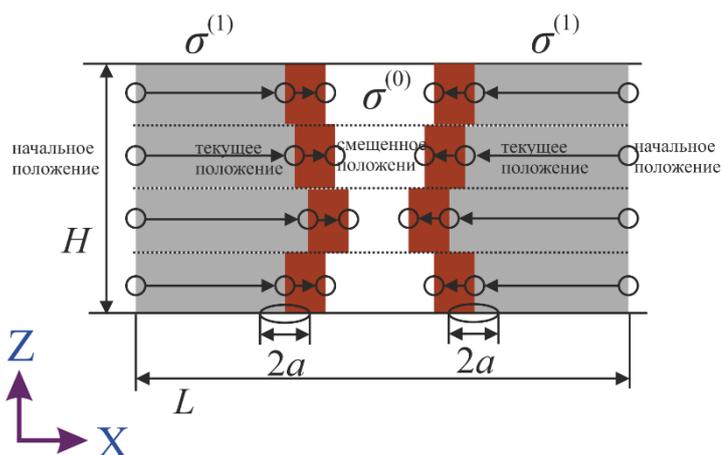


Рис. 3. Движение малоугловых ГЗ наклона под действием сдвига в теоретической модели с учетом неравномерного распределения локальных напряжений в кристалле и пластических деформаций вокруг зернограничных дислокаций

На основе данных МД-моделирования разрабатываются теоретические модели движения и взаимодействия дислокации с медным кластером (рис. 2) и движения малоугловой ГЗ наклона (рис. 3). Движение как зернограничных, так и уединенной дислокации, происходит с учетом неравномерного распределения локальных напряжений в кристалле [8]. Также модель движения дислокации с медным включением использована в схеме двумерной дискретной дислокационной динамики и проведено сравнение с экспериментальными данными [2].

Работа поддержана грантом РФФ, проект № 18-71-10038-Р

Литература

1. David L.M. A perspective on trends in multiscale plasticity // *Int. J. Plast.* 2010. V. 26. P. 1280–1309.
2. Sun W., Zhu Y., Marceau R., Wang L., Zhang Q., Gao X., Hutchinson C. Precipitation strengthening of aluminum alloys by room-temperature cyclic plasticity // *Science* 2019. V. 363. P. 972–975.
3. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *J. Comput. Phys.* 1995. V. 117. P. 1–19.
4. Mishin Y., Farkas D., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations // *Phys. Rev. B* 1999. V. 59. P. 3393.
5. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A., Voter A.F., Kress J.D. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations // *Phys. Rev. B* 2001. V. 63. P. 224106.
6. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Phase stability in the Fe–Ni system: Investigation by first-principles calculations and atomistic simulations // *Acta Mater.* 2005. V. 53. Iss. 15. P. 4029–4041.
7. Apostol F., Mishin Y. Interatomic potential for the Al–Cu system // *Phys. Rev. B.* 2011. V. 83. P. 054116.
8. Krasnikov V. S., Mayer A.E. Influence of local stresses on motion of edge dislocation in aluminum // *Int. J. Plast.* 2018. V. 101. P. 170–187.

УДК: 538.953

Методы оценки энтропии молекулярно-динамической системы

И. В. Аверин^{1,2}, А. В. Тимофеев^{2,1}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

В то время как вычисление многих термодинамических параметров (температура, давление, разница свободных энергий и др.) и транспортных коэффициентов стало достаточно стандартной процедурой, оценка энтропии молекулярно-динамической системы остается достаточно сложной и слабо исследованной задачей с множеством возможных подходов к ее решению. В данной работе рассматриваются методы оценки энтропии на примере системы частиц Леннарда-Джонса вблизи фазового перехода жидкость – твердое тело, которые в дальнейшем планируется применить к анализу результатов численных и физических экспериментов по упорядочиванию системы малого числа пылевых частиц в плазме.

В данной работе рассматривается энтропия Крылова–Колмогорова–Синяя. Она является мерой неустойчивости эволюции системы. К-энтропию можно определить через разбегание первоначально близких траекторий в фазовом пространстве [1]:

$$K = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \langle (x(t) - x_\varepsilon(t))^2 \rangle \right], \quad (1)$$

где $x(t)$ и $x_\varepsilon(t)$ – две фазовые траектории системы, начальные условия которых отличаются на малую величину ε , угловые скобки означают статистическое усреднение. Разбегание фазовых траекторий можно обеспечить немного отличающимися шагами интегрирования, или смещением одной из частиц, или изменением скорости пары частиц [2]. В работе [3] было показано, что К-энтропия имеет характерный излом при фазовом переходе в двумерной XY-модели. Данная энтропия достаточно просто вычисляется в рамках компьютерного моделирования, однако ее получение из данных физического эксперимента представляется затруднительным.

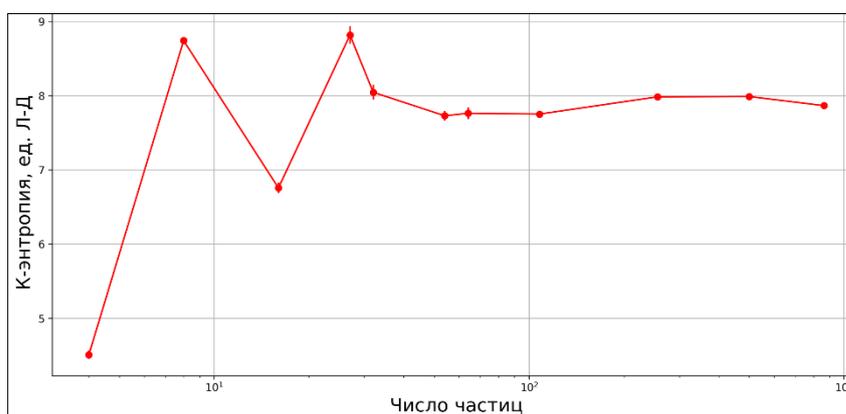


Рис 1. Зависимость К-энтропии от числа частиц в жидкости (плотность 0.85 ед. Л-Д, температура 0.9 ед. Л-Д) с периодическими граничными условиями

Для молекулярно-динамического моделирования леннард-джонсовской системы применялся программный пакет LAMMPS. К-энтропия была рассчитана для различных плотностей и температур по обе стороны от кривой плавления-кристаллизации в периодических граничных условиях. Исследована ее зависимость от числа частиц в системе, результаты представлены на рис. 1. Как видно из рисунка, К-энтропия выходит на константу, начиная с 30 частиц. При меньшем числе частиц значительную роль играет скоррелированность их движения вследствие периодических граничных условий. Небольшие различия при большем числе частиц обусловлено разницей температур.

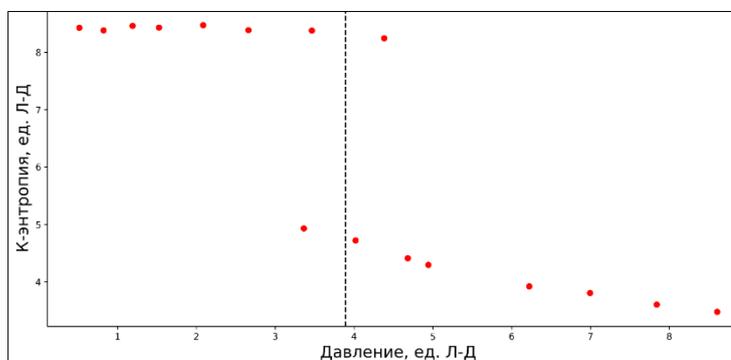


Рис. 2. Зависимость К-энтропии от давления при фиксированной температуре 1.0 ед. Л-Д по обе стороны от точки равновесия жидкой и твердой фаз. Пунктирной линией отмечено соответствующее равновесное давление, взятое из работы [4]

На рис. 2 представлена зависимость К-энтропии от давления при фазовом переходе с фиксированной температурой. Энтропия в жидкости оказалась не зависящей от давления, в твердой же фазе она убывает с ростом давления, причем К-энтропия твердой фазы значительно меньше, чем жидкой.

Также было проведено сравнение К-энтропии с обычной термодинамической энтропией, взятой из работы [5].

Литература

1. *Валуев А.А., Норман Г.Э. и Подлипчук В.Ю.* Энтропия Крылова–Колмогорова неупорядоченных леннард-джонсовских систем // Матем. Моделирование 1990. Т. 2, № 5. С. 3–7.
2. *Норман Г.Э. и Стегайлов В.В.* Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Матем. Моделирование 2012. Т. 24, № 6. С. 3–44.
3. *Butera P. and Caravati G.* Phase transitions and Lyapunov characteristic exponents // Phys. Rev. A 1987. V. 36. P. 962.
4. *Mastny E. And Pablo J.* Melting line of the Lennard-Jones system, infinite size, and full potential // J. Chem. Phys. 2007. V. 127. P. 104504.
5. *Dhabal D. et al.* Excess entropy and crystallization in Stillinger-Weber and Lennard-Jones fluids // J. Chem. Phys. 2015. V. 143. P. 164512.

УДК 536.912

Стохастическая теория метода молекулярной динамики

Д.В. Стрижак¹, М.С. Алексева¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Работа посвящена принципиальным вопросам классического метода молекулярной динамики, являющегося вычислительным средством решения задач статистической физики и являющегося одним из важнейших численных методов в теории конденсированного состояния.

В работе показана негамильтоновость метода молекулярной динамики, являющаяся альтернативным подходом к объяснению флуктуаций полной энергии систем МД вместо введения поправок к функции Гамильтона [1]. На примере модели газа Леннард-Джонса с 4000 частицами, рассмотрена необратимость, связанная с локальной неустойчивостью траекторий и погрешностями численного интегрирования.

Моделирование производилось с помощью LAMMPS [2], решающего численно систему линейных уравнений:

$$\begin{cases} m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \\ \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_i} \end{cases}$$

в потенциале Леннард-Джонса:

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right],$$

где r – расстояние между центрами частиц, ε – глубина потенциальной ямы, σ – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю.

Здесь проведен анализ, аналогичный [3], в котором учтена экспоненциальная расходимость траекторий из-за неустойчивости такой системы по Ляпунову, рассчитаны невязки траекторий для двух траекторий с различными шагами интегрирования.

Также рассмотрено обращение во времени системы, на основе чего сделаны выводы о корректности работы такой системы с помощью стандартных характеристик, например, диффузии (рис. 1).

Из-за того, что МД-системы не являются гамильтоновыми, рассмотрение поправок к потенциалу, не являющихся термостатическими [1], некорректно, система будет испытывать дрейф энергии на больших временах.

Для более подробного анализа таких критериев были рассмотрены флуктуации сил (рис. 2) и спектр этих флуктуаций (рис. 3). В флуктуациях, помимо белого шума, присутствует добавочная сила, распределенная во времени по смещенному распределению Гаусса, согласованному с ранее полученными критериями корректности ММД.

Метод молекулярной динамики был задуман как определение траекторий взаимодействующих друг с другом частиц из решения системы уравнений Ньютона, однако теорема существования и единственности решения задачи Коши не выполняется. Совокупность траекторий частиц, которая фактически рассчитывается в ММД, оказывается иной. Анализ этих вопросов и вытекающих отсюда следствий проведен в настоящей работе.

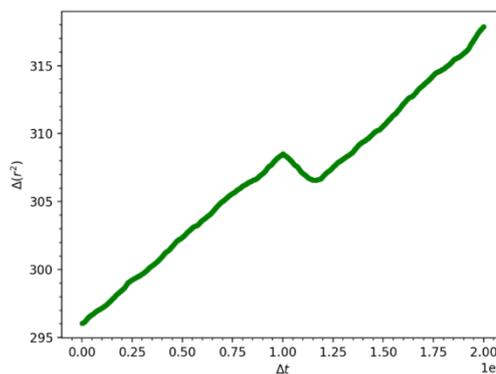


Рис. 1. Зависимость среднеквадратичного смещения частиц от времени.

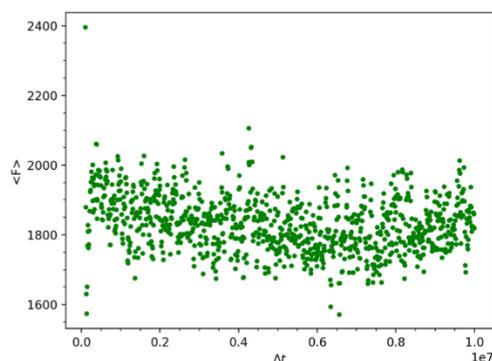


Рис. 2. Зависимость силы от времени.

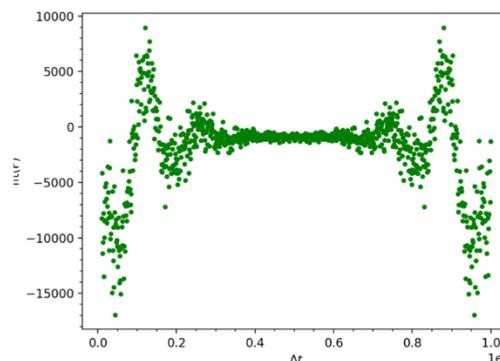


Рис. 3. Спектр флуктуации сил.

Литература

1. *K.D. Hammonds, D.M. Heyes.* Shadow Hamiltonian in classical NVE molecular dynamics simulations: A path to long time stability // J. Chem. Phys. 152, 024114 (2020).
2. *S. Plimpton.* Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J Comp Phys, 117, 1–19 (1995).
3. *Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование, 2012 год, Т. 24, № 6, С. 3–44.

УДК 536.912

О теории метода молекулярной динамики, альтернативной теневому гамильтониану (Shadow Hamiltonian)

М.С.Алексеева, Д.В.Стрижак

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рассмотрен метод молекулярной динамики (МД), основанный на численном решении уравнений движения. Полная энергия при расчете флуктуирует. В зарубежных публикациях присутствует идея рассмотрения новой теории, объясняющей этот факт, так называемый Shadow Hamiltonian, [1].

Согласно данному подходу, система описывается не классическим гамильтонианом, а некоторым новым с некоторой добавкой, соответствующей некоторой случайной силе. Таким образом, полная энергия остаётся постоянной. Но задача найти его уже около 30 лет остаётся безуспешной. При этом другой подход был изложен в статье [2].

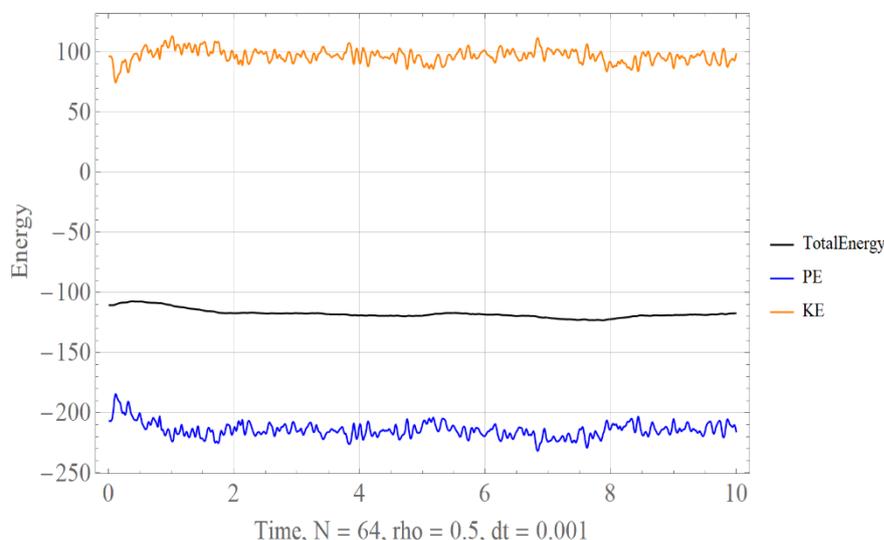


Рис. 1 Флуктуации энергий при моделировании методом молекулярной динамики

Динамика N взаимодействующих атомов описывается системой уравнений, состоящей из второго закона Ньютона и потенциала взаимодействия. При моделировании силы межатомного взаимодействия представимы как градиент потенциальной энергии.

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i(r_1, \dots, r_N)$$

$$F_i(r_1, \dots, r_N) = - \frac{\partial U(r_1, \dots, r_N)}{\partial r_i}$$

Берется система с потенциалом взаимодействия Леннард-Джонса.

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Есть основные моменты, характеризующие отсутствие такого Shadow Hamiltonian. Например, необратимость траектории. Численно решая уравнения движения на каждом шаге, мы получаем новую точку, принадлежащую траектории, но новая точка уже не принадлежит изначальному точному решению задачи Коши. Из-за этого наблюдается необратимость траектории, то есть дойдя до некоторой точки, развернувшись обратно, система никогда не вернётся в начальное положение.

Кроме того, замечено, что расходимость траектории также присутствует. Траектории будут разбегаться экспоненциально, тем самым характеризовать систему таким параметром, как время динамической памяти – сколько времени система помнит начальные условия.

Поиски такого гамильтониана интересная задача, но существуют факторы, которые показывают, что такое описание не является вполне достоверным для метода молекулярной динамики. В частности, если бы энергия сохранялась и во всем, то молекулярная динамика помогала не просто предсказывать определенные свойства разных веществ и описывать разные состояния на некоторых временах, а была бы точной моделью всего окружающего. Теория метода молекулярной динамики стохастическая, и из-за этого больше оснований полагать, что найти теневой гамильтониан – задача, не имеющая решения.

Литература

1. *Hammonds K.D. and Heyes D.M.*, Shadow Hamiltonian in classical NVE molecular dynamics simulations: A path to long time stability, 2020.
2. *Норман Г.Э., Стегайлов В.В.*, Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики, 2012.

УДК 538.9

Образования вихрей в турбулентном потоке на молекулярном уровне

Д.Г. Павлов^{1,2}, В.В. Стегайлов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

На макроскопическом уровне поведение жидкостей и газов хорошо описывается уравнениями Навье–Стокса. Долгое время исследование поведения жидкостей и газов было невозможно из-за недостатка вычислительных мощностей. Однако современные технологии позволяют проводить молекулярно-динамические расчеты с беспрецедентными масштабами и временными рамками.

Подобные исследования уже были проведены [1], но на меньших размерах системы ($N=10^4$). С момента проведения этого исследования технические возможности исследователей сильно возросли.

Для молекулярно-динамического исследования вихрей были использованы GPU ускорители. Данный подход позволяет сильно увеличить скорость моделирования благодаря превосходству архитектуры GPU над архитектурой CPU при решении хорошо параллелизуемых задач.

Для визуализации и конвертации данных было использовано свободное ПО OVITO [2].

Литература

1. *Rapaport D. C., Clementi E.*, Eddy Formation in Obstructed Fluid Flow: A Molecular-Dynamics Study // *Phys. Rev. Lett.* 57, 695. Published 11 August 1986.
2. *Stukowski A.* Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 18, 2010, 015012.

УДК 538.91

Влияние эффектов конкуренции различных типов анизотропии на поведение мультислойных магнитных структур

А.В. Минькова, П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

Свойства ультратонких магнитных пленок особо восприимчивы к эффектам магнитной анизотропии [1], которая возникает из-за нарушения симметрии на границе раздела фаз при возникновении напряжений из-за несоответствия параметров кристаллических решеток [2, 3].

В данной работе было рассмотрено влияние двух конкурентных типов анизотропии – анизотропии типа «легкая плоскость» и одноионной анизотропии на поведение трехслойной магнитной структуры, состоящей из двух ферромагнитных слоев Co, разделенных немагнитным слоем Cu. Для моделирования свойств мультислойной структуры использовалась анизотропная модель Гейзенберга [4]. Компьютерное моделирование проводилось методами Монте-Карло при использовании алгоритма Метрополиса. Гамильтониан исследуемой структуры имеет следующий вид [5]:

$$H = -J_1 \sum_{i,j \in N_1 N_2} [\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \Delta(N) S_i^z S_j^z] - J_2 \sum_{\alpha \in N_1, \beta \in N_2} \mathbf{S}_\alpha \mathbf{S}_\beta - A \sum_i (S_i^z)^2 - \mathbf{h} \sum_i \mathbf{S}_i \quad (1)$$

где J_1 – интеграл внутрислоевого обменного взаимодействия, J_2 – интеграл межслоевого обменного взаимодействия, A характеризует одноионную анизотропию, \mathbf{h} – приложенное магнитное поле, $\Delta(N)$ – параметр анизотропии типа «легкая плоскость», зависящий от числа слоев пленки, N – толщина пленки, N_1 и N_2 – толщины первой и второй пленки трехпленочной структуры соответственно, \mathbf{S} – трехмерный классический спин в решетке.

В работе был проведен расчет магнитных характеристик, рассматриваемой мультислойной структуры для $N = 3, 5, 7, 9, 11$ монослоев и для различных значений константы одноионной анизотропии A .

На рис. 1 представлено поведение восприимчивости для данной мультислойной структуры. Получено, что пики восприимчивости смещаются в область более низких температур при увеличении параметра одноионной анизотропии. По пикам восприимчивости получены значения критических температур при устремлении линейного размера к бесконечности.

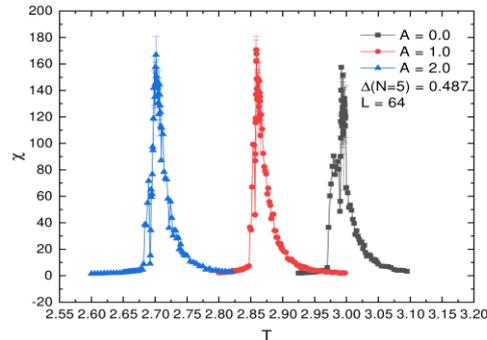


Рис. 1. Результаты моделирования восприимчивости χ в зависимости от температуры T для параметров одноионной анизотропии $A=0.0, 1.0, 2.0$ и параметра анизотропии типа «легкая плоскость» $\Delta(N=5)=0.49$ при линейном размере $L=64$

На рис. 2 представлены результаты компьютерного моделирования намагниченности в зависимости от направления приложенного магнитного поля. Получены результаты для разных параметров двух различных видов анизотропии. Выявлено, что при изменении параметра анизотропии типа «легкая плоскость» – то есть при уменьшении его значения с увеличением толщины пленки, начиная с $N = 9$ проявляются эффекты одноионной анизотропии при $A = 2.0 J_1$.

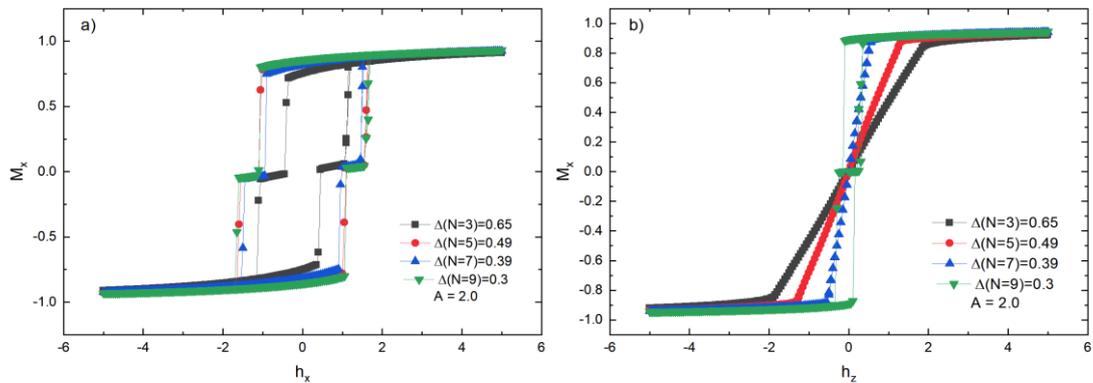


Рис. 2. Результаты моделирования намагниченности, направленной вдоль оси X в зависимости от магнитного поля h , приложенного а) вдоль оси X и б) вдоль оси Z для разных толщин пленок с разными значениями параметра анизотропии типа «легкая плоскость»

Также было рассмотрено поведение намагниченности в зависимости от приложенного магнитного поля при изменении параметра одноионной анизотропии. Получено, что при значении $A=3.0$ петля гистерезиса при направлении поля вдоль оси X «схлопывается», а при рассмотрении значений $A=3.0$ и $A=4.0$ можно наблюдать, что петля гистерезиса появляется при направлении поля вдоль оси Z. Это происходит, потому что эффекты одноионной анизотропии становятся сильнее, чем эффекты типа «легкая плоскость». Предсказываемые явления по влиянию эффектов анизотропии могут быть использованы при исследовании и проектировании спин-вентильных структур.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ.

Литература

1. He X.D., Zhang L.L., Wu G.J., Gao J.W., Ran P., Muhammad Sajjad, Zhou X.W., Cao J.W., Xi L., Zuo YL., Ren Y.

- Controllable intrinsic Gilbert damping in Pt buffered [Co/Ni]_n multilayers with enhanced perpendicular magnetic anisotropy // *J. Magn. Magn. Mater.* 2021. V. 519. art. 167429.
2. *Vaz C.A.F., Bland J.A.C., Lauhoff G.* Magnetism in ultrathin film structures // *ReP. Prog. Phys.* 2008. V. 71. art. 056501.
 3. *Prudnikov P. V., Prudnikov V. V., Mamonova M.V., Piskunova N.I.* Influence of anisotropy on magnetoresistance in magnetic multilayer structures // *J. Magn. Magn. Mater.* 2019. V. 482. P. 201–205.
 4. *Prudnikov P. V., Prudnikov V. V., Menshikova M.A., Piskunova N.I.* Dimensionality crossover in critical behaviour of ultrathin ferromagnetic films // *J. Magn. Magn. Mater.* 2015. V. 387. P. 77–82.
 5. *Prudnikov P. V., Prudnikov V. V., Danilova A.Yu., Borzilov V. O., Baksheev G.G.* Non-equilibrium critical dynamics of low-dimensional magnetics and multilayer structures // *EPJ Web Conf.* 2018. V. 185. art. 11009.

УДК 538.91

Моделирование процессов немонотонной релаксации намагниченности несимметричной мультислойной магнитной структуры

Д.А. Льготина, П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

Магнетизм тонких пленок является развивающейся областью изучения и анализа с важными применениями в качестве магнитной среды для записи и хранения информации в запоминающих устройствах [1]. Теоретическое предположение, что наибольшее преимущество в плотности поверхности для термомагнитной записи HAMR достигается, когда максимальная температура нагрева близка к температуре Кюри или превышает ее [2]. Магнитные пленки имеют особенности, благодаря которым их использование может способствовать повышению плотности записи информации до 1 ТБ/дюйм.

Рассмотрено влияние начального состояния на процесс релаксации мультислойных магнитных структур с одноионной анизотропией. В настоящей работе ставится задача проведения численного Монте-Карло исследования неравновесного поведения с применением алгоритма Метрополиса, для мультислойной магнитной структуры, состоящей из ферромагнитных пленок, разделенных слоем немагнитного металла.

Гамильтониан для моделирования магнитных свойств мультислойной структуры с намагниченностью пленок, ориентированной перпендикулярно плоскости пленок, брался в виде

$$H = -J_1 \sum_{i,j \in N_s} \vec{S}_i \vec{S}_j - J_2 \sum_{\alpha \in N_1, \beta \in N_2} \vec{S}_\alpha \vec{S}_\beta - A \sum_{i \in N_s} (S_i^z)^2 - h_z \sum_{i \in N_s} S_i^z, \quad (1)$$

где $S_i = S_i^x, S_i^y, S_i^z$ - трёхмерный спин в i -ом узле всей системы; $N_s = 2 \cdot NL^2$ - полное число спинов в системе; α, β - индексы ферромагнитных пленок N_1 и N_2 соответственно; A - константа, характеризующая одноионную анизотропию, которая создается подложкой вдоль оси перпендикулярной плоскости монослоя.

В работе рассматривалась мультислойная структура из ферромагнитных пленок с толщинами $N_1 = 4$ ML; $N_2 = 2$ ML; линейным размером $L = 32$. Параметры гамильтониана выбирались таким образом, чтобы соответствовать работе [3]. Значение обменного интеграла, определяющего взаимодействие между пленками, $J_2 = -0.2 J_1$. Отрицательность J_2 отражает тот факт, что в мультислойных структурах с эффектом ГМС толщина немагнитной прослойки подбирается так, чтобы дальнедействующее и осциллирующее межслоевое обменное РККИ взаимодействие между спинами ферромагнитных слоев носило эффективный антиферромагнитный характер. За счет этого взаимодействия намагниченности соседних ферромагнитных слоев ориентируются противоположно друг другу. Таким образом, рассматриваемая структура моделирует искусственно создаваемые мультислойные структуры, характеризующиеся проявлением эффектов гигантского магнетосопротивления.

Проводился расчет намагниченности ферромагнитной пленки по оси z :

$$m_n^z(t) = \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} S_i(t) \right\rangle, \quad (2)$$

где n - номер пленки; $\langle \dots \rangle$ обозначают статистическое усреднение по реализации начального состояния.

Модуль полной намагниченности ферромагнитной пленки задается формулой:

$$m_n = \left\langle \frac{1}{N_S} \left[\left(\sum_{i=1}^{N_S} S_i^x \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^{N_S} S_i^y \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^{N_S} S_i^z \right)^2 \right]^{1/2} \right\rangle. \quad (3)$$

Полная намагниченность системы определяется как: $m_{total} = \vec{m}_1 + \vec{m}_2$.

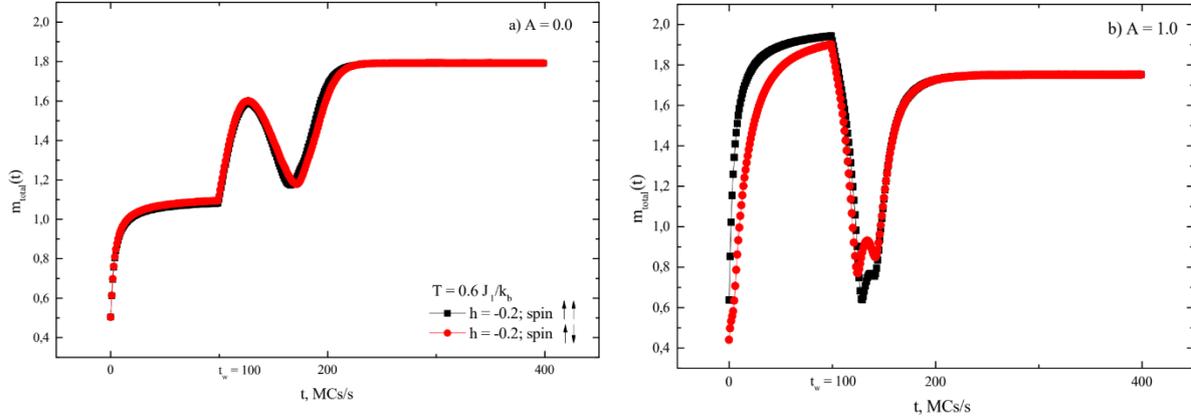


Рис. 1. Релаксация модуля полной намагниченности мультислойной структуры с параметрами: $N_1 = 4$ ML; $N_2 = 2$ ML; $L = 32$; $J_2 = -0.2J_1$ из низкотемпературного начального состояния $T = 0.0$ J/k_B со значением внешнего магнитного поля $h = 0.2$ при значениях константы анизотропии $A = 0.0$ (a) и $A = 1.0$ (b). Стрелками указано начальное состояние спинов каждой пленки соответственно

Проводилось определение релаксации намагниченности для мультислойных структур. Для определения зависимости намагниченности от времени было выбрано общее число шагов MCs/s, равное 5000, для релаксации отводилось 1000 шагов MCs/s. Статистическое среднее осуществлялось по 1000 прогонкам. Среднее время работы программы для расчета временной зависимости намагниченности 15 минут на 1 конфигурацию.

Представлено влияние анизотропии A на поведение релаксации полной намагниченности мультислойной магнитной структуры.

Релаксация намагниченности с константой одноионной анизотропии $A = 0.0$ и значением магнитного поля $h = 0.2$ после времени ожидания $t_w = 100$ не меняет свое релаксационное поведение в зависимости от начального состояния спинов. При увеличении константы одноионной анизотропии, точки экстремумов в поведении магнитной релаксации достигают более низких значений намагниченности для сонаправленного начального состояния спинов.

Магнитная релаксация во внешнем поле с отрицательным значением $h = -0.2$ имеет тип осциллирующей релаксации намагниченности при рассматриваемых значениях константы анизотропии $A = 0.0$ и $A = 1.0$. Полученный тип релаксаций намагниченности соответствует классификации магнитной релаксации наблюдаемой в экспериментальной работе [4].

Поведение релаксации намагниченности мультислойных структур существенно зависит от начального температурного состояния. Для высокотемпературного начального состояния системы $T = 10.0$ J/k_B осциллирующий вид намагниченности не наблюдался. В дальнейшем исследовании будет уточняться интервал полей, при котором наблюдается осциллирующая магнитная релаксация в рассматриваемой структуре.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ.

Литература

1. Chappert C., Fert A. The emergence of spin electronics in data storage // Nature Mater. 2007. V. 6. P. 813–823.
2. Lyberatos A., Guslienko K.Y. The thermodynamic limits of magnetic recording // J. Appl. Phys. 2003. V. 111. P. 033909.
3. Fache T., Tarazona H.S., Liu J., L'vova G., Applegate M.J. et al. Nonmonotonic aftereffect measurements in perpendicular synthetic ferrimagnets // Phys. Rev. B. 2018. V. 98. P. 064410.
4. Моргунов Р.Б., Безверхний А.И., Дмитриев О.С., Бахметьев М.В. Условия возникновения спонтанной осциллирующей магнитной релаксации в синтетических ферримангнетиках Pt/Co/Ir/Co/Pt // ФТТ. 2020. Т. 62. В. 62. С. 407.

Моделирование методом Монте-Карло критических свойств усложненного спинового вентиля

А.С. Егорина, П.В. Прудников

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

Физика ультратонких магнитных пленок с толщинами от одного-двухатомных слоев до нескольких десятков слоев является направлением интенсивных исследований. Повышенный интерес ученых вызван целым рядом уникальных свойств пленок, отличающихся от свойств объемных материалов, что обуславливает важность этих новых объектов как для развития фундаментальных основ физики, так и для физики приложения. Ультратонкие пленки из магнитных металлов и сплавов являются составляющими элементами магнитных сплавов магнитных спи-вентильных структур (рис. 1), которые активно применяются в устройствах с эффектами гигантского магнитосопротивления (ГМС) [1, 2].

Спиновые вентили, образованные на основе ультратонких пленок, находят широкое применение в микроэлектронике, вычислительной физике, клинической биомедицине [4]. Магнитные пленки обладают рядом уникальных особенностей, способствующих повышению плотности записи информации, точности и быстродействия запоминающих устройств и в ГМС-сенсорах для обнаружения и измерения биомолекул [5].

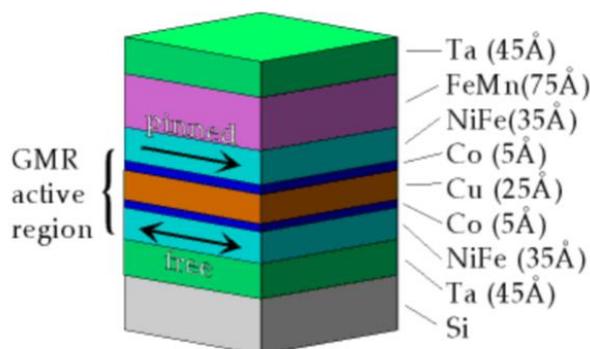


Рис. 1. Спин-вентильная структура на основе ультратонких магнитных пленок [3]

Осуществлено моделирование методом Монте-Карло усложненных спиновых систем, описываемых трехмерной анизотропной моделью Гейзенберга. Структуры с намагниченностью перпендикулярной плоскости пленок описаны гамильтонианом [6]:

$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \{ (1 - \Delta_1(N)) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \} - h \sum_i S_i^z, \quad (1)$$

В выражении (1) $\langle i, j \rangle$ показывает, что суммирование по ближайшим соседям. $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – трехмерный единичный вектор спина, зафиксированный в i -м узле ГЦК-решетки. $\Delta_1(N)$ – параметр, учитывающий эффективное влияние анизотропии типа «легкая ось», создаваемой кристаллическим полем подложки, зависящий от толщины слоев N . J_{ij} – обменный интеграл, характеризующий взаимодействие ближайших спинов в пленках. Параметр $h = g\mu_B H$ описывает влияние внешнего магнитного поля, ориентированного перпендикулярно плоскости пленок (вдоль оси z).

Проведено моделирование равновесного поведения обычного спинового вентиля, описываемого трехмерной анизотропной моделью Гейзенберга с анизотропией типа «легкая ось». Получены гистерезисные эффекты в зависимости намагниченности от приложенного внешнего магнитного поля в обычных спин-вентильных структурах. Верхний «свободный» слой спин-вентильной структуры, помещенной в слабое магнитное поле, легко изменяет конфигурацию магнитных моментов вслед за полем, выстраивая ее антипараллельно нижнему слою. Присутствие такого перехода указывает на наличие эффектов ГМС.

Проведено моделирование неравновесного критического поведения усложненного спинового вентиля, описываемого трехмерной анизотропной моделью Гейзенберга с анизотропией типа «легкая

ось». Рассмотрены физические свойства усложненной спин-вентильной структуры, состоящей из трех ферромагнитных слоев, разделенных пленками немагнитных металлов, где один из ферромагнитных слоев спарен с антиферромагнетиком, закрепляющим намагниченность данного слоя. Изучены временные зависимости намагниченности в усложненном спиновом вентиле. Проведен анализ релаксации намагниченности из высокотемпературного и низкотемпературного начального состояния. Выявлены эффекты старения, которые были подтверждены коллапсом данных для динамических скейлинговых зависимостей.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ.

Литература

1. *Vaz C.A.F., Bland J.A.C., Lauhoff G.*, Magnetism in ultrathin film structures, *ReP. Prog. Phys.* 2008. V. 71 056501.
2. *Baibich M.N., Broto J.M., Fert A., Van Dau F.N., Petro F., Etienne P., Creuzet G., Friederich A., Chazelas J.*, Giant magnetoresistance of (001) Fe/ (001)Cr magnetic superlattices, *Phys. Rev. Lett.* 1988. V. 61. P. 2472–2475.
3. *Anthony T. C., Brug J. A., Shufeng Zhang*, Magnetoresistance of symmetric spin valve structures. *IEEE Transactions on Magnetics*, 30(6), 3819–3821.
4. *Subhas Chandra Mukhopadhyay, Komkrit Chomsuwan, Chnithaka P. Gooneratne, and Sotoshi Yamada*, A Novel Needle-Type SV-GMR Sensor for Biomedical Applications // *IEEE Sensors journal*, 7(3), P. 401, 2007.
5. *M.Djamal, Ramli, F. Haryanto and Khairurrijal*, Biosensors for Health, Environment and Biosecurity, C.6. P. 150. 2011.
6. *Prudnikov P. V., Prudnikov V. V., Mamonova M.A., Piskunova N.I.* Influence of anisotropy on magnetoresistance in magnetic multilayer structures // *J. Magn. Magn. Matter.* 2019. V. 482. P. 201–205.

УДК 538.9

Статистический анализ эволюции точечных дефектов в каскадах смещений на примере хромита

М.С. Шеверев¹, В.В. Стегайлов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

В работе рассматривается образование каскадов смещений, возникающих при выбивании потоком нейтронов атомов из кристаллической решетки хромита (FeCr_2O_4). Рассматривается эволюция этих каскадов на больших временах симуляции, а также зависимость их основных параметров от энергии первоначально выбитой частицы. Исследование ведется методом молекулярной динамики [1–2]. Для описания взаимодействия атомов в веществе используется потенциал Букингема с кулоновским членом [3], а также потенциал ZBL [4] для описания взаимодействия атомов на малых расстояниях. Для описания кулоновского взаимодействия используются методы Р³М и РМЕ. Для визуализации и обработки результатов моделирования используется пакет Ovito [5].

Исследование радиационных повреждений материалов – важная фундаментальная проблема современного материаловедения. Одним из основных проявлений радиационного воздействия является генерация каскадов атомных смещений в материале, возникающих при столкновениях распадающихся частиц с атомами кристаллической решетки. Для таких исследований активно применяется метод молекулярной динамики [6–7].

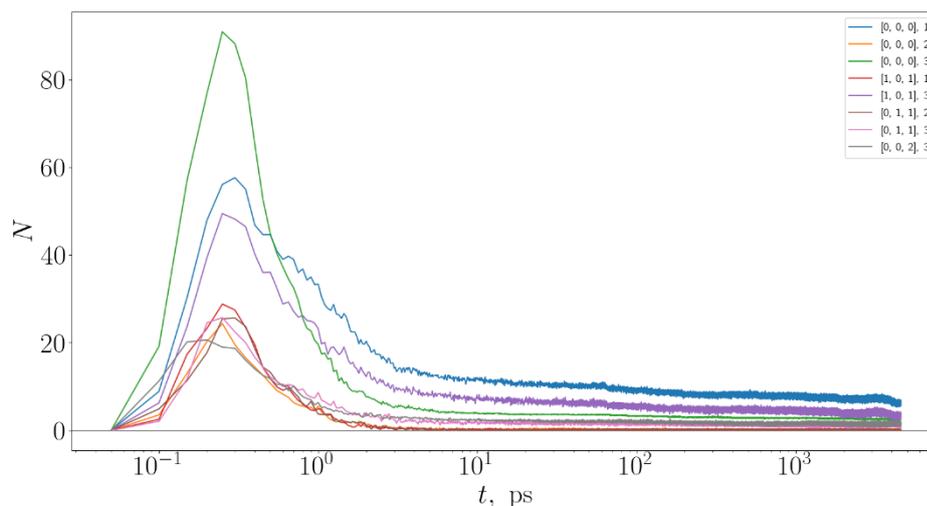


Рис. 1. Зависимость от времени количества основных типов дефектов при энергии ПВА 3 кэВ

Данная работа направлена на определение основных характеристик образующихся каскадов смещений, а также построение численной модели, позволяющей определять эти характеристики в зависимости от различных параметров, таких как энергия первично выбитого атома и время, прошедшее с образования каскада. Рассматриваются изменения, происходящие в структуре хромита в присутствии радиационного фона, сравнивается влияние на свойства хромита этих изменений по сравнению с изменениями, вызываемыми другими процессами, такими как, например, диффузия. Также проводится сравнение различных платформ для молекулярно-динамических расчетов с целью увеличения доступного времени симуляции.

Хромит, как и некоторые другие оксиды, образуется на поверхности легированных сталей в результате их окисления. Свойства поверхности таких сталей могут значительно влиять на применимость этих сталей для тех или иных задач, например на возможность их использования в реакторах нового поколения [7]. Исследование процессов в таких оксидах и их свойств может занимать продолжительное время и быть достаточно ресурсоемким. Однако применение методов молекулярной динамики может, в перспективе, значительно оптимизировать исследование свойств поверхностей таких сталей, снижая количество необходимых экспериментальных данных до небольшого набора контрольных измерений, подтверждающих корректность численной модели. При этом может быть выявлена важная статистика, которую невозможно получить другими методами.

Работа проведена при поддержке РФФИ (грант № 20-21-00159).

Литература

1. Gibson J.B. et al. Dynamics of radiation damage // Physical Review. 1960. Т. 120, № 4. С. 1229.
2. Khiara N. et al. A novel displacement cascade driven irradiation creep mechanism in α -zirconium: A molecular dynamics study // Journal of Nuclear Materials. 2020. Т. 541. С. 152336.
3. Vaari J. Molecular dynamics simulations of vacancy diffusion in chromium(III) oxide, hematite, magnetite and chromite // Solid State Ionics. Elsevier. 2015. V. 270. P. 10–17.
4. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Matter // Treatise on Heavy-Ion Science. 1985. V. 1.
5. Stukowski A., Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. V. 18. P. 015012.
6. Zolnikov K.P. et al. Molecular dynamics simulation of primary radiation damage in Fe–Cr alloy // J. Phys.: Conf. S. 2016. V. 774. P. 012130.
7. Abu-Shams M., Haider W., Shabib I. Evolution of displacement cascades in Fe–Cr structures with different [001] tilt grain boundaries // Radiation Effects and Defects in Solids, Incorporating Plasma Science and Plasma Technology. 2017. V. 172. P. 364–378.

Построение поликристаллической структуры диоксида циркония с применением потенциала, нестабильного при переходных процессах

Т. М. Савилов^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Объединенный институт высоких температур РАН

Диоксид циркония широко применяется в различных отраслях. В частности, в водородной энергетике он необходим для электролиза благодаря его тугоплавкости и высокой проводимости [1].

В большинстве случаев используется поликристаллический материал с множеством зёрен. Значительную роль в процессах переноса играют границы зёрен. Поэтому для моделирования диоксида циркония с целью предсказания свойств первостепенной задачей является переход от простой монокристаллической системы к поликристаллической.

При моделировании монокристалла [2] было обнаружено, что система с потенциалом, включающим в себя механизм поляризации ионов под воздействием внешнего поля, может разрушаться при достижении больших температур или давлений. Это вызвано тем, что оболочки ионов, обладающие массой 0,001 а. е. м., могут попасть в бесконечную яму потенциала Бакингема–Кулона и вызвать распад системы.

Тем не менее в той же работе было показано, что данный потенциал обладает хорошей перспективой воспроизведения транспортных свойств диоксида циркония на примере коэффициента диффузии. Поэтому была поставлена задача перейти к моделированию поликристаллических структур с применением данного потенциала.

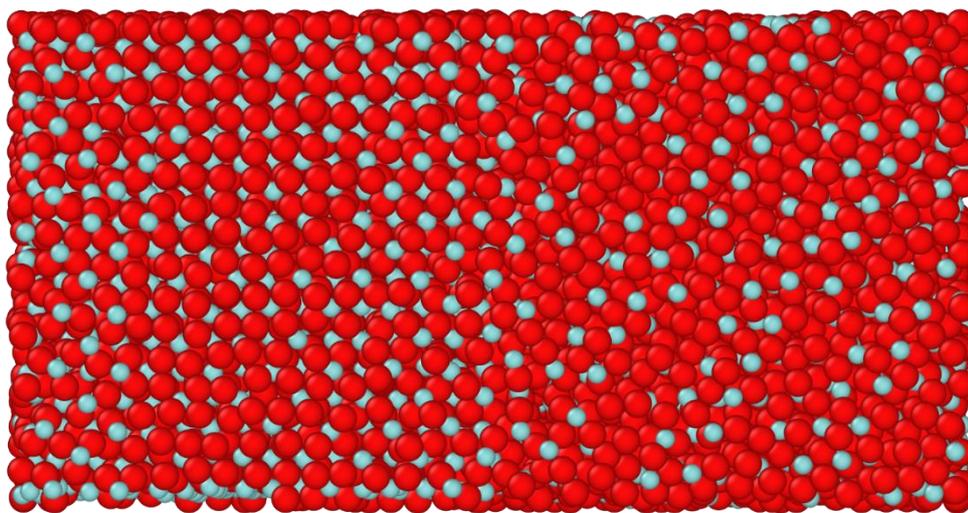


Рис. 1 Бикристалл диоксида циркония, полученный методом из данной работы

Для решения данной задачи была использована программа AtomsK с открытым исходным кодом [3]. В ней конструировался поликристалл на основе базиса для гранцентрированной кубической решётки. Затем с помощью дополнительно написанных программ на C++ файл с координатами преобразовывался в необходимый формат. После этого удалялись вначале слишком близкие ионы (попадающие в яму потенциала Бакингема–Кулона), а затем дополнительно удалялось необходимое число ионов в случайных узлах решётки для получения соотношения Zr:O 1:2 для электрической нейтральности системы.

Произведя данные действия, применялся потенциал без механизма поляризации, так как он стабилен при переходных процессах. С помощью метода молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS [4] в NPT-ансамбле система выводилась на давление 100 кбар и необходимую температуру (за исходную была взята 2000 К). После этого система выводилась на нулевое давление и требуемую температуру. Координаты записывались в dump-файл, который в дальнейшем конвертировался в необходимый формат для потенциалов с поляризацией и без неё.

После всех преобразований было получено, что система стабильно ведёт себя при дальнейшем моделировании в NPT и NVE ансамблях. На рис. 1 представлен простейший бикристалл, построенный с помощью данного метода.

В дальнейшем планируется изучение поведения простейшей системы в зависимости от параметров зёрен бикристалла, моделирование поликристалла и добавление примесей с целью стабилизации кубической фазы диоксида циркония.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 18-19-00734.

Литература

1. Радченко Р.В., Мокрушин А.С., Тюльпа В.В. Водород в энергетике. Учебное пособие. Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2014. 229, [3] с.
2. Savilov T.M. et al. The effect of atomic polarization on the diffusion coefficient of oxygen ions in cubic zirconia // 2021 J. Phys.: Conf. Ser. 1787 012011.
3. Pierre Hirel Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files // Comput. Phys. Comm. 197 (2015) 212-219.
4. Plimpton S., Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J Comp Phys, 117, 1-19 (1995).

УДК 538.935

Универсальные соотношения для временной эволюции локализованных состояний

А.Е. Обжиров

Гарвардский университет

В различных системах электронный транспорт можно рассматривать как динамику локализованных электронных состояний. Однако не существует универсальной теории, которая описывала бы временную эволюцию локализованных состояний. В данной работе рассматриваются универсальные соотношения такого движения. Показано, что движение локализованных электронных состояний происходит путем обмена позиций с близлежащими электронными состояниями, которые образуют антипересечение энергетических уровней. Антипересечения энергетических уровней, образованных близлежащими электронными состояниями, являются адиабатическими, в то время как антипересечение энергетических уровней, образованных удаленными друг от друга состояниями, являются диабатическими. Для иллюстрации этой идеи разработана численная модель на основе андерсоновской локализации. Представленный механизм позволяет прояснить электронный транспорт в наноструктурах и неупорядоченных полупроводниках, а также переходы металл-изолятор.

УДК 538.955

Первопринципные расчеты магнитной анизотропии пленок Fe и Co с прослойкой платины

М.Ю. Макеев, М.В. Мамонова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

В данной работе проведены *ab-initio* расчеты энергетических и магнитных характеристик ферромагнитных пленок Fe и Co на поверхности Pt. Расчет энергии магнитной анизотропии (МАЭ), определяемой как разность полных энергий системы при различных ориентациях магнитного момента, является довольно сложной задачей с точки зрения продолжительности расчетов, а также большого количества необходимых вычислительных ресурсов. Расчеты проводились с использованием программного комплекса VASP [1]. В основе расчетов лежит теория функционала плотности DFT, совместно с приближением обобщенного градиента и разложением по присоединенным плоским волнам PAW PBE.

Исследуемая система состоит из ферромагнитных пленок, адсорбированных с обеих сторон на немагнитной металлической пластине толщиной от 3 до 15 моноатомных слоев. Использовалась периодическая суперячейка с постоянной решетки, соответствующей подложке, полученной в результате расчетов с учетом полной оптимизации решетки.

Получены значения энергии магнитной анизотропии неколлинеарных спиновых конфигураций атома Fe на подложке Pt. Рассчитаны значения энергетической выгодности ферро- и антиферромагнитных конфигураций.

Также было проведено исследование структуры на основе пленки Fe в зависимости ориентации поверхностной грани. Результаты расчетов МАЭ и магнитных моментов для монослойных пленок Fe, разделенных прослойкой Pt, приведены на рис. 2 и в табл. I. Показано, что перпендикулярная анизотропия для монослойных пленок Fe с прослойкой Pt возникает лишь для грани (100) у всех толщин пластины Pt и для грани (110) для толщины пластины Pt в 5 монослоев. Для грани (111) у всех исследуемых толщин немагнитной прослойки Pt более энергетически выгодна анизотропия типа легкая плоскость со значениями $E_{MA} = E_{\perp} - E_{\parallel} \approx 0.5 - 1.0$ мэВ.

Исследовано значение МАЭ для системы, состоящей из ферромагнитной пленки железа от одного до трех моноатомных слоев и немагнитной подложки платины толщиной в три моноатомных слоя при разных направлениях магнитного момента. Направление магнитного момента изменялось в плоскости XZ, начиная с положения, перпендикулярного направлению оси X, меняя угол с шагом в 10 градусов, до положения намагниченности, параллельного оси X. Полученные результаты для граней (100) и (110) представлены на рис. 3.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

Таблица I: Результаты расчетов μ , μ_B монослойной пленки Fe при толщине пластины Pt 9 ml в сравнении с результатами расчетов, полученных с помощью формализма (KKR) при толщине подложки Pt в 37 ml [2] и на полубесконечной поверхности Pt [3].

Таблица 1

Тип упорядочения	(111)	(110)	(100)
	2.98 3.018 [3]	3.15	3.06
⊥	2.97 2.92 [2] 3.016 [3]	3.15	3.05

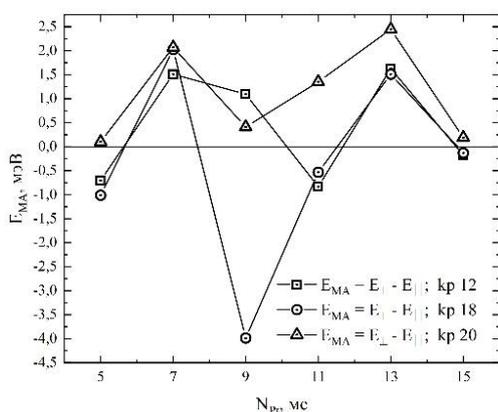


Рис. 1: Зависимость энергии магнитной анизотропии E_{MA} от толщины немагнитной прослойки при разных размерах k-сетки

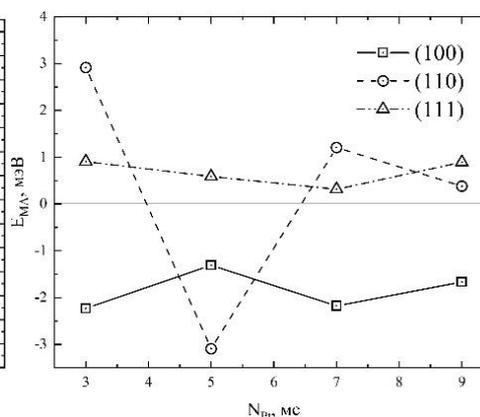


Рис. 2: Значение магнитной анизотропии для системы 1Fe/Pt/1Fe в зависимости от толщины прослойки платины для разной ориентации поверхностной грани

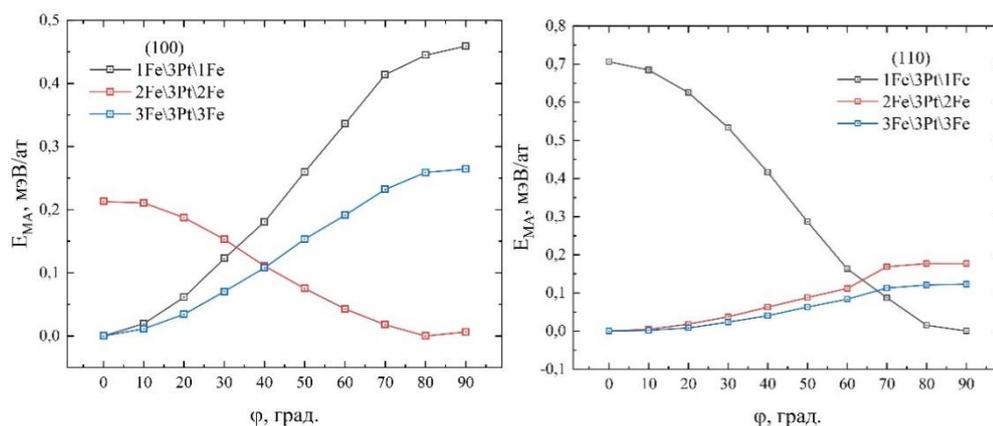


Рис. 3 Значение приведенной E_{MA} на атом для граней (100) и (110) в зависимости от угла направления магнитного момента в плоскости XZ для систем, состоящих из трех монослоев платины и толщинах ферромагнитной пленки от одного, до трех слоев

Литература

1. P. G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev. B* 1996, *B*, 11169.
2. C. Etz, J. Zabloudil, P. Weinberger and E. Y. Vedmedenko *Phys. Rev. B* 77, 18, 184425 (2008).
3. S. Bornemann, O. Siper, S. Mankovsky, S. Polesya, J. B. Staunton, W. Wurth, H. Ebert // *J. Minar Phys. Rev. B* 86, 10, 104436 (2012).

УДК 538.955

Теоретическое исследование влияния ориентации поверхностной грани на реализацию спиновых конфигураций в системе Co/Cu/Co

Р.А. Сухачев, М.В. Мамонова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

Магнетизм тонких пленок представляет собой активную область исследований, результаты которых имеют важное технологическое влияние. Научный интерес в исследованиях этой области обусловлен тем, что результаты этих исследований вносят существенный вклад в развитие самой физики магнетизма, в частности решения ее фундаментальных проблем [1].

В данной работе были проведены численные исследования энергетических и магнитных свойств системы Co/Cu/Co [2], помощью программного комплекса Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [3], в основе расчетов которого лежит теория функционала плотности.

Рассчитывалась зависимость полной энергии системы от параметров сходимости: размерности сетки интегрирования в обратной решетке Kpoints и энергии обрезания Encut. Начиная со значения энергии обрезания Encut=500 эВ, изменение полной энергии суперячейки происходит незначительно ($\pm 0,001$ эВ). Оптимальным было выбрано значение Encut = 600 эВ. Сходимость полной энергии суперячейки (с точностью равной $\pm 0,001$ эВ) по количеству точек разбиения в первой зоне Бриллюэна для АФМ и ФМ конфигураций наблюдается в окрестности Kpoints=20-28, при этом разность энергий АФМ и ФМ конфигураций сходится только, начиная с Kpoints=36-42. Оптимальным было выбрано значение Kpoints=48.

На рис. 1 представлена зависимость разности энергии АФМ- и ФМ-структур одного атома суперячейки от количества слоев подложки при разном количестве слоев магнитного материала.

Приведенные на рисунке расчеты разности энергий АФМ- и ФМ-конфигураций Co/Cu/Co в зависимости от количества слоев подложки в 3–9 монослоя и магнитного материала в 1–3 монослоя показали, что наиболее энергетически выгодной ферромагнитная конфигурация становится при количестве слоев подложки в 9 монослоев и магнитного материала в 3 монослоя с $\Delta E=22$ мэВ. В остальных случаях колеблется вблизи нуля, что не позволяет сделать однозначного вывода. Исследование зависимости магнитных свойств системы от количества монослоев Co показало, что полученные в ходе расчетов значения магнитного момента хорошо соотносятся с экспериментальными данными других исследователей.

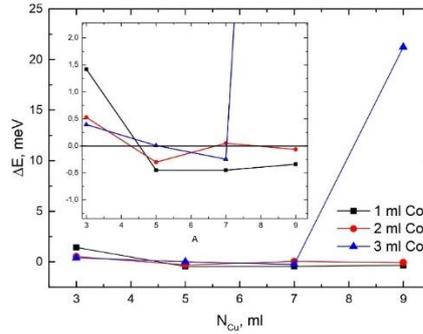


Рис. 1. Зависимость разности энергии AFM и FM структур одного атома суперячейки от количества слоев подложки при разном количестве слоев магнитного материала, $K_{\text{points}}=48$, $E_{\text{cut}}=600$ эВ

В таблице представлено среднее значение магнитного момента атома Co в зависимости от толщины пленок Co, рассчитанные нами и приведенные в статьях других авторов.

Система	ML	$\mu_{\text{tot}}/\text{atom}$, μ_B	$\mu_{\text{tot}}/\text{atom}$, μ_B
Co/Cu/Co	1	1.826 0	2.111 [4]
			1.901 [5]
			1.891 [6]
	2	1.691 0	1.73 [7]
			1.74 [8]
			2.1(3) [9]
3	1.715 0	1.81 [10]	

В таблице представлены значения полных энергий для системы Co/Cu/Co с гранями 100, 110 и 111 при направлении векторов намагниченности в плоскости пленки и перпендикулярно ей. E_{col} полная энергия системы Co/Cu/Co для разных граней, при коллинеарном направлении магнитных моментов, $E_{\text{m}||}$ полная энергия системы Co/Cu/Co для разных граней, при неколлинеарном направлении магнитных моментов вдоль оси x, $E_{\text{m}\perp}$ полная энергия системы Co/Cu/Co для разных граней, при неколлинеарном направлении магнитных моментов вдоль оси z, $E_{\text{ma}} = E_{\text{m}\perp} - E_{\text{m}||}$ – энергия магнитной анизотропии.

Грань	E_{col} , eV	$E_{\text{m} }$, eV	$E_{\text{m}\perp}$, eV	E_{ma} , meV
100	-22.676597	-22.717099	-22.716201	0.8979
110		-21.663702	-21.663726	-0.0239
111		-23.282756	-23.281794	0.961

Вычисления, описывающие влияние ориентации поверхностной грани на энергию магнитной анизотропии показали, что для граней (100) и (111) наиболее энергетически выгодным является направление магнитных моментов параллельно плоскости пленки. Для грани (110) была получена слабая перпендикулярная магнитоанизотропия.

Исследование выполнено при финансовой поддержке
 Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002)

Литература

1. *Nielsen J.W.* Magnetic Bubble Materials. // Annu. ReV. Mater. Sci, 1979 V. 9, P. 87–121.
2. *Stearns M.B., Wijn H.P. J.* Properties of Magnetic Materials. Berlin: Landolt-Bornstein, New Series. 1986. V. 19a. P. 384.
3. *Kresse G., Marsman M., Furthmuller J.* VASP the GUIDE // Wien:Universitat Wien. 2016. P. 238. URL:https://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasP.pdf

4. Hjortstam O., Tyregg J., Willis J.M., Johansson B., Eriksson O. Calculated spin and orbital moments in the surfaces of the 3d metals Fe, Co, and Ni and their overlayers on Cu(001) // Phys. Rev. B. 1996 V. 53. P. 9204–9213
5. Wu R., Freeman A.J. Magnetic circular dichroism at the K and L edges of Co and Cu in Co/Cu(001) // J. Appl. Phys. 1996 V. 79. P. 6500.
6. Shick A.B., Novikov D.L., Freeman A.J. Relativistic spin-polarized theory of magnetoelastic coupling and magnetic anisotropy strain dependence: Application to Co/Cu(001) // Phys. Rev. B 1997. V. 56. P. 561–583.
7. Johnson M.T., Bloemen P. J.H., den Broeder F.J.A., de Vries J.J. Magnetic anisotropy in metallic multilayers // ReP. Prog. Phys. 1996. V. 59. P. 1409.
8. Pustogowa U., Szunyogh L., Ebert H., Weinberger P. Spin-polarized X-ray emission spectroscopy of capped thin Co films on Cu(100) // Solid State Commun. 1998. V. 108. P. 343–348.
9. Willis R.F., Bland J.A.C., Schwarzacher W. Ferromagnetism in ultrathin metastable films of fcc Fe, Co, and Ni (invited) // J. Appl. Phys. 1998. V. 63. P. 4051–4075.
10. Kim M., Freeman A.J., Wu R. Surface effects and structural dependence of magneto-optical spectra: Ultrathin Co films and CoPt_n alloys and multilayers // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 9432–9436.

УДК 538.911

Разработка генератора случайных структур с фиксированными положениями структурных элементов для эволюционного алгоритма USPEX

Я.В. Пропад¹, И.А. Круглов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

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

На сегодняшний день существуют алгоритмы, осуществляющие поиск стабильных кристаллических структур при заданных условиях. Одним из них является USPEX [1] – эволюционный алгоритм, основанный на следующей схеме: инициализация и создание первого поколения из случайных кристаллических структур (с учетом ограничений на объем ячейки, количества и типов атомов, и т.д.); релаксация сгенерированных структур; создание следующего поколения из лучших локально оптимизированных структур прошлого поколения и новых структур, случайных или сгенерированных с помощью применения вариационных операторов. Данный алгоритм позволяет учитывать при генерации некоторую структурную информацию, например, ограничить поиск с помощью задания фиксированных размеров ячейки или фиксированного объема, запустить поиск структуры с известными или гипотетическими структурами, сгенерировать кристаллическую структуру из предполагаемых молекул. Генерация кристаллических структур представляет большую задачу [2].

В то же время, существующие генераторы случайных структур в USPEX не способны создавать структуры, в которых позиции некоторых структурных единиц (атомов или молекул) зафиксированы, а других – могут меняться. Эта задача крайне важна, когда в ходе эксперимента удается определить позиции одних атомов, а других – нет (например, в случае рентгеновской дифракции для гидридов, где позиции атомов водорода определить невозможно). В нашей работе мы представляем данный подход к генерации структур как дополнение к уже существующим алгоритмам USPEX и T-USPEX. Подход основан на следующем алгоритме (рис. 1):

На вход алгоритма подаются пространственные данные исходной ячейки. Далее указываются типы атомов и молекул, которые необходимо поместить в ячейку, а также их количество, и приводятся минимальные межатомные расстояния для всех пар типов атомов, включая те, которые уже находятся в исходной ячейке. На ячейку накладывается сетка из прямых, параллельных её векторам. Узлы сетки, удовлетворяющие межатомным расстояниям, добавляются в список потенциальных координат для новых атомов или молекул. Переменные r_1 , r_2 и r_3 , обозначающие количество частей, на которые будет разделена ячейка, задаются вручную. После помещения в ячейку атомов или молекул проводится проверка корректности межатомных расстояний, и, если расстояния некорректны, то алгоритм продолжает работу, пока не найдёт подходящее положение для атомов или молекул. В случае работы с молекулами необходимо после помещения молекулы в ячейку каждый раз переопределять доступное пространство, в которое может быть помещена следующая молекула, чтобы избежать их пространственное наложение. Если после помещения молекулы ячейка не проходит проверку на соблюдение минимальных межатомных расстояний, то молекула поворачивается вокруг центра масс, либо ей присваиваются другие координаты из списка доступных. Сгенерированные ячейки релаксируются в VASP при

заданных условиях, затем происходит отбор лучших структур по энергиям. На рис. 2 представлен пример работы алгоритма для гидрида серы.

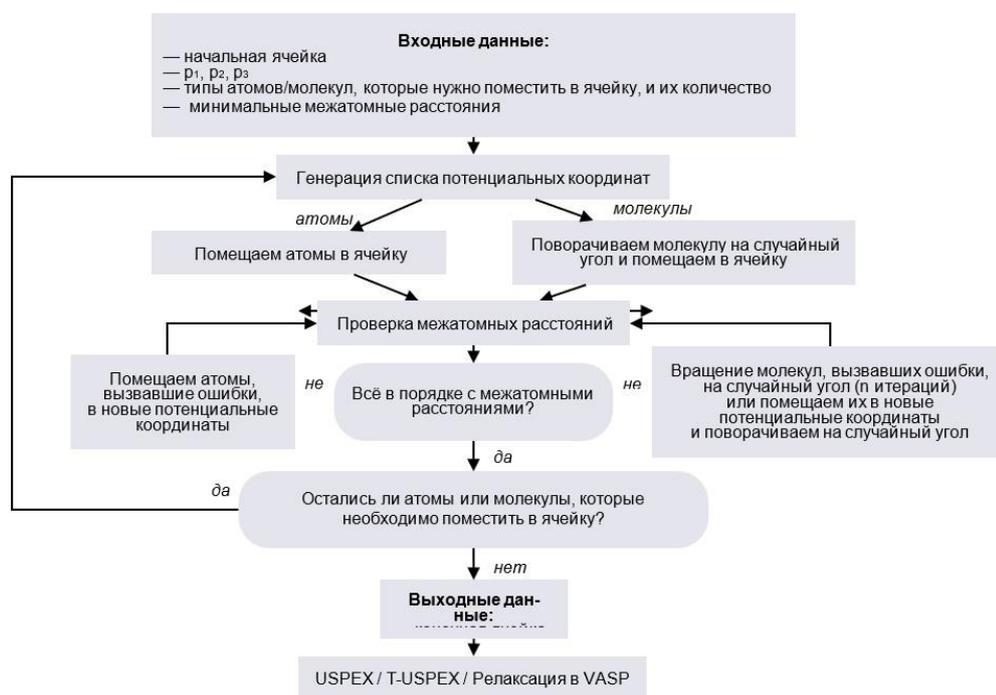


Рис. 1. Алгоритм генератора случайных структур с фиксированным положением структурных элементов

Работа алгоритма была протестирована на гидридах серы, лантана и урана, а также на некоторых молекулярных кристаллах и их сольватах. В дальнейшем планируется улучшение алгоритма для генерации наиболее разнообразных структур и внедрение в алгоритм USPEX.

Работа выполнена при поддержке РФФ № 21-73-10261.

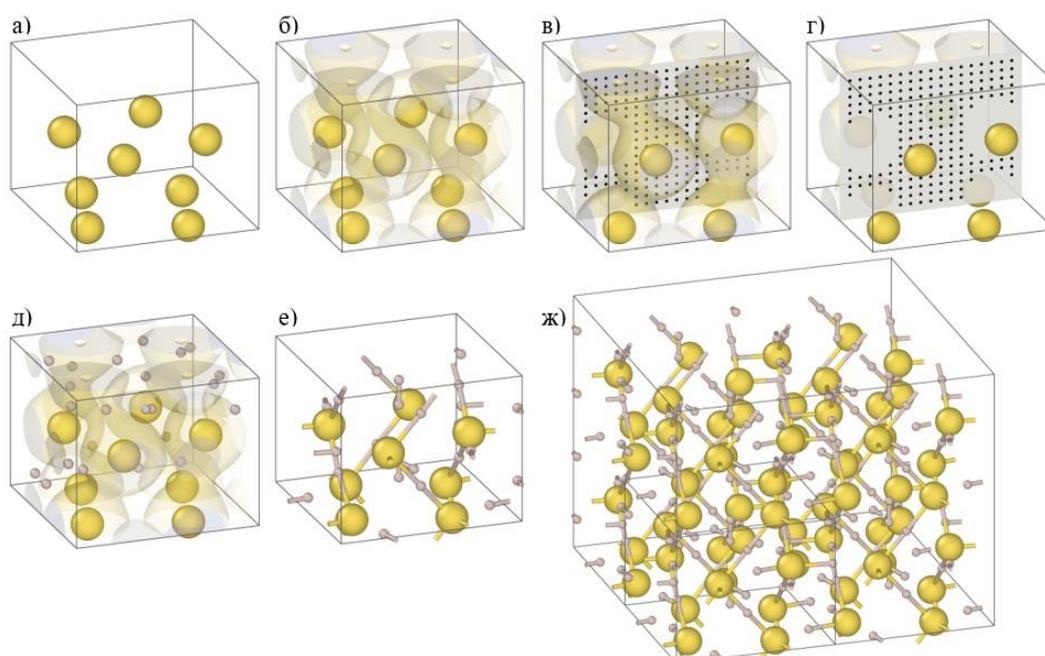


Рис. 2. Работа алгоритма по нахождению устойчивых структур гидрида серы: а) исходная ячейка с атомами серы; б) сферы вокруг атомов серы, внутрь которых при генерации не могут попасть атомы водорода; в) и г) сечение исходной ячейки, черными точками обозначены координаты, в которые могут быть помещены атомы водорода; д) сгенерированная ячейка; е) и ж) сгенерированная ячейка после релаксации в VASP

Литература

1. Glass C.W., Oganov A.R., Hansen N. USPEX – Evolutionary crystal structure prediction // Comput. Phys. Commun. 2006. V. 175. P. 713–720.
2. Lyakhov A.O., Oganov A.R., Valle M. How to predict very large and complex crystal structures // Comput. Phys. Commun. 2010. V. 181. P. 1623–1632.

УДК 538.91

Первопринципные расчёты магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6

Д.В. Евсин, В.О. Борзилов, П.В. Прудников, М.В. Мамонова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

Киральность является одним из основных понятий, лежащих в основе симметричных свойств природы, проявляющихся в различных масштабах. Под киральностью понимается свойство объекта не совмещаться в пространстве со своим зеркальным отражением [1]. Экспериментальные исследования кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 показали наличие зависимости периода кирального гелимагнетика от внешнего магнитного поля при постоянной температуре, а именно кроссовер в состояние киральной солитонной решётки [2]. В данной работе проводились расчёты магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 первопринципными методами.

Использовался пакет VASP (Vienna Ab Initio Simulation Package) – это комплексный пакет для выполнения ab initio квантового механического моделирования с использованием псевдопотенциалов или метода проекционных волн и базисного набора плоских волн. Подход, реализованный в VASP, основан на приближении локальной плотности (конечной температуры) со свободной энергией как вариационной величиной и точной оценке мгновенного основного состояния электрона на каждом временном шаге. VASP использует эффективные схемы диагонализации матрицы и эффективное смещение плотности заряда Бройдена.

Кристаллическая структура исследуемой системы CrNb_3S_6 представлена на рис. 2. В расчётах гелимагнитной пленки использовалась 20-ти атомная суперъчейка с постоянной решетки $a = 10.84892$ а.е. [3]; число k-точек сетки Монкхорста–Пака принималось равным 16; энергия обрезания – 500 эВ; вакуумный слой – 5 Å; вектор распространения спирали $q = 0,5a$ направлен вдоль оси y.

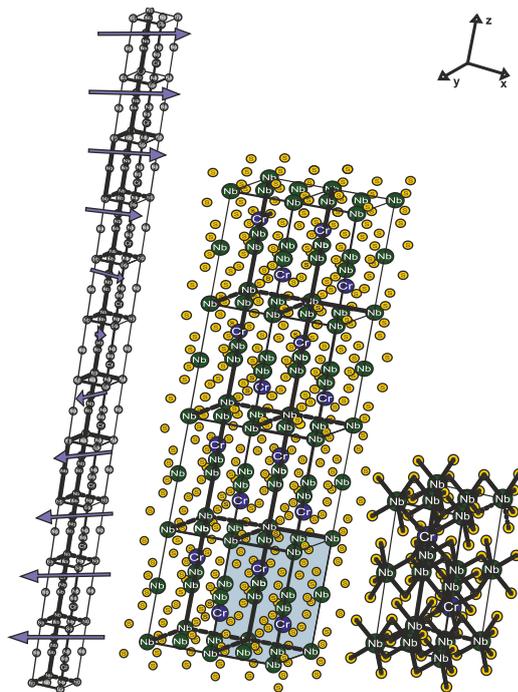


Рис. 1. Кристаллическая структура одноосного гелимагнетика CrNb_3S_6 . Стрелки указывают направление намагниченности слоя

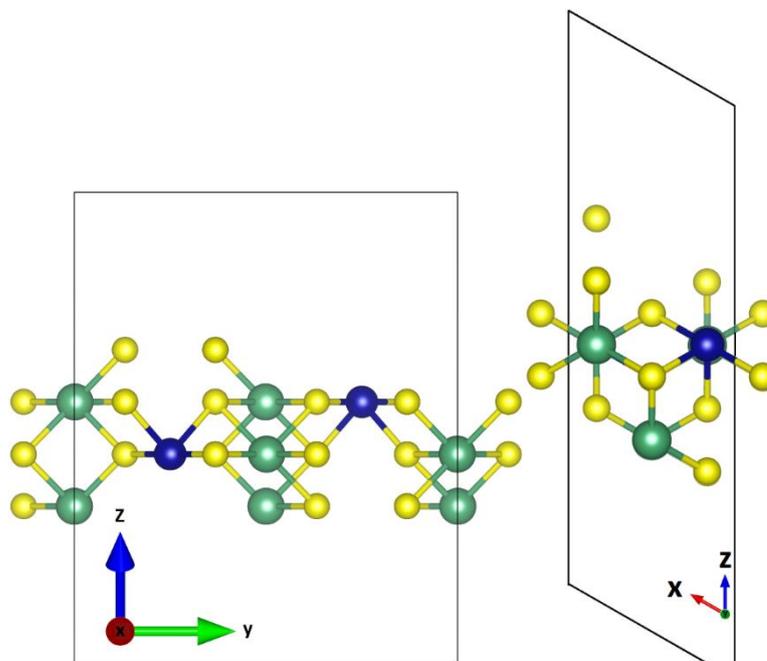


Рис. 2. Кристаллическая структура плёнки CrNb_3S_6

В ходе расчётов были получены следующие значения проекций намагниченности магнитных моментов двух атомов хрома: $\mu_x(\text{Cr}_1) = 0,045$, $\mu_y(\text{Cr}_1) = 1,866 \mu_B$, $\mu_x(\text{Cr}_2) = -0,039 \mu_B$, $\mu_y(\text{Cr}_2) = 1,861 \mu_B$. Так же было получено значение полной энергии системы $E_{\text{tot}} = -141.30798 \mu_B$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и грантом МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН», Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН, Суперкомпьютерного центра МГУ им. М.В. Ломоносова.

Литература

1. *Togawa Y., Kousaka Y., Inoue K.* Symmetry, Structure, and Dynamics of Monoaxial Chiral Magnets // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2016. V. 85. 112001.
2. *Togawa Y. et al.* Anomalous Temperature Behavior of the Chiral Spin Helix in CrNb_3S_6 Thin Lamellae // *Phys. Rev. L.* 2019. V. 122. 017204.
3. *Ghimire N.J. et al.* Magnetic phase transition in single crystals of the chiral helimagnet $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$ // *Phys. Rev. B.* 2013. V. 87. 104403.

УДК 539.2

Первопринципные расчеты структурных, энергетических и магнитных характеристик пленки никеля на поверхности вольфрама

М.В. Мамонова, В.В. Прудников, И.Е. Шевченко

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

Рассмотрены явления заместительной адсорбции монослойной ферромагнитной плёнки никеля на поверхности вольфрама, а также ее магнитные, структурные и энергетические свойства в зависимости от толщины пленки при различных положениях адатома и для случаев неколлинеарной магнитной анизотропии типа легкая плоскость и легкая ось.

Исследование проводилось в рамках двух подходов метода функционала спиновой плотности: вариационного [1], с учётом температурных эффектов и неоднородного распределения намагниченности, и первопринципного, реализованного с помощью программного комплекса VASP [2]. Основная идея МФСП состоит в том, что при описании электронной подсистемы, многоэлектронная волновая функция $\Psi(r_{1\dots r_N})$, зависящая от большого числа переменных в

конфигурационном пространстве, заменяется электронной плотностью $\rho(r)$, определяемой в обычном трехмерном пространстве.

$$\rho(r) = \langle \Psi | \sum_{i=1}^N \delta(r - r_i) | \Psi \rangle = \sum_{v=1}^N \sum_{\alpha=1,2}^N |\Psi_v(r)|^2, \quad (1)$$

Для обеспечения возможности расчета магнитных свойств энергия системы также записывается и в виде функционала плотности намагниченности $m(r)$. Волновые функции Кона–Шэма заменяются двухкомпонентными в.ф. Паули $\Psi_{\alpha i}$, способными представлять как плотность электронов, так и плотность намагниченности. Индекс α обозначает здесь спиновые состояния.

$$m(r) = \sum_{v=1}^N \Psi_v^*(r) \sigma \Psi_v(r), \quad (2)$$

$$\sigma = \sigma_x \hat{x} + \sigma_y \hat{y} + \sigma_z \hat{z}, \quad (3)$$

Вариационным методом были посчитаны межфазная энергия, энергия неактивированной адсорбции и энергия активированной адсорбции системы Ni/W в зависимости от параметра покрытия и температуры. Параметр покрытия варьировался от 0,4 до 1 с шагом 0,05, температура изменялась от 0К до 300 К. Полученные результаты можно увидеть на рис. 1.

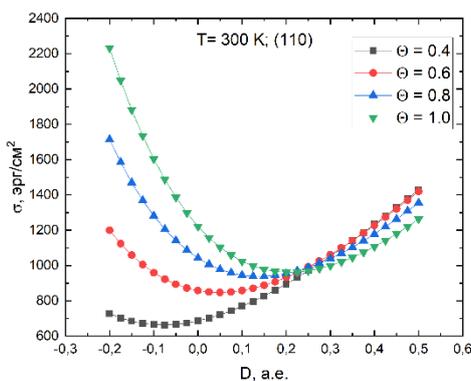


Рис. 1. Зависимость межфазной энергии от величины зазора D а.е. для значений параметра покрытия $\Theta = 0.4$; 0.6; 0.8; 1.0, при температуре $T = 300$ К для грани (110)

Расчеты энергии активированной адсорбции проводились для пленки никеля на подложке из вольфрама при различных температурах ($T = 0$, $T = 150$, $T = 300$) рис. 2.

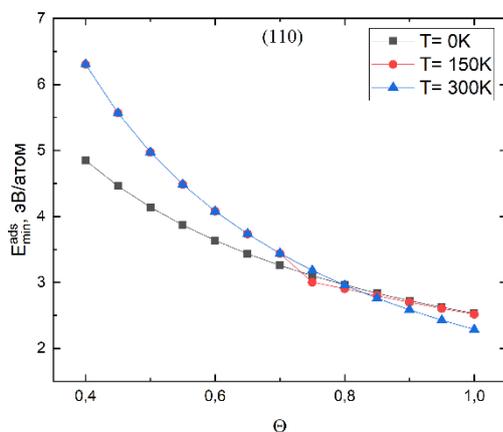


Рис. 2. Зависимость активированной энергии адсорбции от параметра покрытия Θ при различных температурах для грани (110)

Результаты расчетов магнитных моментов, рассчитанные в рамках первопринципного подхода МФСП приведены в табл. 1.

Таблица 1. Значения магнитных моментов атомов Ni полученные для неколлинеарного случая магнитной анизотропии типа легкая плоскость и легкая ось системы Ni на W

nNi	Init.P.	μ^3_{\parallel} , μ_B	μ^2_{\parallel} , μ_B	μ^1_{\parallel} , μ_B	μ^3_{\perp} , μ_B	μ^2_{\perp} , μ_B	μ^1_{\perp} , μ_B
1	hollow			0,000			0,000
	ontop			0,000			0,000
	longbr			0,000			0,000
	shrtbr			0,000			0,000
2	hollow		0,568	0,162		0,129	0,040
	ontop		0,587	0,194		0,590	0,125
	longbr		0,598	0,190		0,182	0,055
	shrtbr		0,600	0,185		0,080	0,022
3	hollow	0,741	0,624	0,128	0,746	0,625	0,123
	ontop	0,071	0,089	0,025	0,491	0,413	0,083
	longbridg	0,748	0,630	0,122	0,745	0,621	0,124
	shrtbri	0,730	0,618	0,117	0,732	0,616	0,121

В данной таблице μ^3 , μ^2 , μ^1 μ_B – значения магнитных моментов атомов.

Литература

1. Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В. Теоретические методы расчета структурных, энергетических и магнитных характеристик систем с межфазным взаимодействием. Омск: Ом. гос. Ун-та, 2007. 190с.
2. Marsman G., Kresse M. VASP the GUIDE. Wien, 2000. P. 208.

УДК 539.3

Использование машинного обучения для построения модели упругопластической деформации алюминия

М.В. Леканов, А.Е. Майер

Челябинский государственный университет

При динамическом нагружении металла деформирование кристаллической решетки может быть описано упругопластической моделью. В данной работе для описания пластической деформации используется модель дислокационной пластичности, основанная на уравнениях эволюции усредненных полей плотности и скорости дислокаций. Для описания упругой составляющей деформации (тензорное уравнение состояния) используется аппроксимация зависимостей между деформацией и напряжением с помощью нейронной сети. Нейронной сетью также описывается гомогенная нуклеация дислокаций как начало пластической деформации в идеальном монокристалле. Данные для составления тензорного уравнения состояния и функции порога гомогенной нуклеации дислокаций получены из моделирования процессов сжатия и растяжения алюминиевого образца при разных температурах с помощью программного пакета LAMMPS. Эти же данные используются для идентификации параметров модели дислокационной пластичности при помощи алгоритма Байеса. Определяющие уравнения обобщены на случай конечных деформаций. Тензор конечных деформаций Грина выглядит как [1]:

$$L_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} + \frac{\partial u_k}{\partial X_i} \frac{\partial u_k}{\partial X_j} \right), \quad (1)$$

он полностью характеризует упругую деформацию материала, данный тензор можно определить с помощью градиента упругой деформации:

$$\mathbf{L}_G = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e - \mathbf{I}), \quad (2)$$

где \mathbf{I} – единичный диадик. \mathbf{F}^e определяет упругую деформацию движения твердого тела с кристаллической решеткой от промежуточной до текущей конфигурации. \mathbf{F}^p определяет пластический сдвиг материала от эталонной конфигурации до промежуточной конфигурации, в которой ориентация решетки и расстояние между ними неизменны. Из изменения положения частицы можно определить градиент полной деформации:

$$\mathbf{F} = \mathbf{u} \nabla_x + \mathbf{I}. \quad (3)$$

Пластичность основана на движении дислокаций, их образовании и аннигиляции в процессе нагружения [2]:

$$\mathbf{F}^e = \mathbf{w}^p \mathbf{F}^p, \quad (4)$$

где \mathbf{w}^p – тензор пластической деформации, изменение компонент тензора пластической деформации полностью описывается движением различных групп дислокаций:

$$\mathbf{w}^p = \sum_{\beta} \frac{1}{2} [(\mathbf{b}^{\beta} \otimes \mathbf{n}^{\beta}) + (\mathbf{b}^{\beta} \otimes \mathbf{n}^{\beta})^T] v_D^{\beta} \rho_D^{\beta}, \quad (5)$$

где ρ_D^{β} – скалярная плотность дислокаций, v_D^{β} – скорость скольжения дислокаций, \mathbf{b}^{β} и \mathbf{n}^{β} – вектор Бюргерса и нормаль к плоскости скольжения для соответствующей группы дислокаций, \mathbf{T} означает транспонирование. Так как в общем виде градиент полной деформации выглядит как [3]:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p, \quad (6)$$

Градиент упругой деформации можно определить из известных \mathbf{F}^p и \mathbf{F} :

$$\mathbf{F}^e = \mathbf{F} \frac{1}{|\mathbf{F}^p|} (\mathbf{F}^p)^T. \quad (7)$$

Для получения данных для аппроксимационной функции, описывающей зависимости в тензорном уравнении состояния вещества и в пороге нуклеации, мы используем молекулярно-динамическое моделирование деформации образца монокристаллического алюминия с помощью программного пакета LAMMPS. В рамках аккумуляции данных проводилось моделирование изотермического сжатия и растяжения образца из 500 000 атомов. Инженерная скорость деформации варьировалась в диапазонах от $-0,05$ до $0,05$ и от $-0,005$ до $0,005$ обратных пикосекунд для трех различных направлений деформирования вдоль осей x , y и z . Моделирование проходило при различных температурах в диапазоне от 100 до 900 К. Для построения тензорного уравнения состояния отбирались данные, соответствующие только упругой деформации, то есть рассматривались временные отрезки до начала образования дефектов решетки. Полученные результаты использовались для обучений нейронной сети, в которой в виде входных данных используется набор значений компонент относительной деформации и внутренней энергии $\{L_1, L_2, L_3, E\}$, в виде выходных данных – значения компонент напряжения и температуры $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, T\}$. Далее обученная нейронная сеть используется в качестве аппроксимирующей функции зависимостей уравнения состояния. Модель пластической деформации дополнена слагаемым, учитывающим скорость нуклеации новых дефектов в зависимости от степени деформирования образца; для определения скорости нуклеации также используется обученная нейросеть. Помимо этого, обучалась нейронная сеть, показывающая «удаление» текущего деформированного состояния от порога гомогенной нуклеации. Пластическая часть МД-данных использовалась для идентификации параметров модели дислокационной пластичности методом Байеса.

Таким образом, в рамках работы проведено обобщение континуальной модели дислокационной пластичности на случай конечных деформаций и предложены методы идентификации параметров модели методами машинного обучения с использованием данных МД-моделирования.

Работа поддержана грантом РФФ 20-11-20153.

Литература

1. *Meiž Дж.* Теория и задачи механики сплошных сред. М.: Мир, 1974. 318 с.
2. *Khan A.S. et al.* A deformation mechanism based crystal plasticity model of ultrafine-grained/nanocrystalline FCC polycrystals // *Int. J. Plast.* 2016. V. 86. P. 56–69.
3. *Khan A.S. et al.* Strain rate effect of high purity aluminum single crystals: experiments and simulations // *Int. J. Plast.* 2015. V. 67. P. 39–52.

УДК 538.931

Молекулярно-динамический расчет транспортных коэффициентов *n*-додекана методом масштабирования избыточной энтропии

Б.И. Никитюк^{1,2}, В.В. Писарев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Транспортные коэффициенты жидких углеводородов представляют большой интерес в различных областях индустрии, таких как разработка смазочных и топливных жидкостей, моделей нефтяных месторождений и способов их разработки. Часто эти области характеризуются экстремальными условиями, что затрудняет проведение экспериментов и повышает востребованность молекулярного моделирования для определения свойств веществ.

Известно, что транспортные коэффициенты жидкости описываются функцией избыточной энтропии системы по сравнению с идеальным газом [1]. При этом вид этой функции квазиуниверсален для конкретного типа жидкости даже в областях нарушения соотношения Стокса–Эйнштейна [2]. Существует ряд моделей, базирующихся на различных уравнениях состояния жидкостей, предсказывающих точный вид этой функции от состояния вещества. Эти модели обладают хорошей предсказательной способностью [3]. Так, вязкость *n*-алканов может быть предсказана с точностью порядка 5% в широком диапазоне температур и давлений [4]. Однако этот метод может быть использован без выбора конкретного уравнения состояния. Избыточная энтропия в рамках молекулярной динамики может быть рассчитана напрямую при помощи термодинамического интегрирования для конкретной системы. Таким образом, для этой системы численно может быть построена зависимость транспортных коэффициентов от состояния системы, предположительно универсальная на области применимости потенциала.

В работе изучается применимость этого метода для системы *n*-додекана C₁₂H₂₆ в полноатомном потенциале OPLS-AA [5] с оптимизацией зарядов на атомах на сервере LigParGen [6,7,8]. Исследование ведется методом молекулярной динамики с помощью пакета LAMMPS [9].

Литература

1. *Dyre J.C.* Perspective: Excess-entropy scaling // *J. Chem. Phys.* 2018. V. 149, P. 210901
2. *Bell I.H., Dyre J.C., Ingebrigtsen T S.* Excess-entropy scaling in supercooled binary mixtures // *Nat. Commun.* 2020. V. 11, N 1. P. 1–12.
3. *Baled H.O. et al.* Viscosity models for pure hydrocarbons at extreme conditions: A review and comparative study // *Fuel.* 2018. V. 218. P. 89–111.
4. *Lötgering-Lin O., Gross J.* Group contribution method for viscosities based on entropy scaling using the perturbed-chain polar statistical associating fluid theory // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2015. V. 54, N 32. P. 7942–7952.
5. *Jorgensen W.L., Maxwell D.S., Tirado-Rives J.* Development and testing of the OPLS all-atom force field on conformational energetics and properties of organic liquids // *J. Am. Chem. Soc.* 1996, V. 118, N 45 P. 11225–11236.
6. *Jorgensen W.L., Tirado-Rives J.* Potential energy functions for atomic-level simulations of water and organic and biomolecular systems // *PNAS* 2005 V. 102, N 19 P. 6665–6670.
7. *Dodda L.S., Vilseck J.Z., Tirado-Rives J., Jorgensen W.L.* 1.14* CM1A-LBCC: localized bond-charge corrected CM1A charges for condensed-phase simulations // *J. Phys. Chem.* 2017. V. 121, N 15 P. 3864–3870.

8. *Dodda L.S., Cabeza de Vaca I., Tirado-Rives J., Jorgensen W.L.* LigParGen web server: an automatic OPLS-AA parameter generator for organic ligands // *Nucleic Acids Res.* 2017. V. 45, N W1 P. W331–W336.
9. *Plimpton S.* Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *J. Comp. Phys.* 1995. V. 117, N 1. P. 1–19.

УДК 538.931

Исследование потенциала средней силы на границах двухфазной системы

Г.К. Вандышев

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Двухфазные системы достаточно долгое время являются объектом исследования с точки зрения физико-химических свойств и транспорта ионов через границу. Важнейшей величиной, характеризующей двухфазные системы, является разность свободной энергии, так как дает возможность исследовать равновесие растворов. Обычно для ее нахождения используется метод термодинамического интегрирования. При этом возникает проблема подсчета разности между достаточно большими величинами, это означает, что вычисления должны проходить с большой точностью. В данной работе предложен новый метод вычисления разности стандартной свободной энергии между двумя средами с помощью потенциала средней силы.

Из-за изотропности среды внутри жидкости на ионы действует нулевая средняя сила, однако, вблизи границы фаз это перестает быть таковым и можно ввести не нулевую среднюю силу, действующую на ионы, направленную по нормали к поверхности раздела. Зная ее, можно рассчитать эффективный потенциал средней силы, который и характеризует изменение свободной энергии.

Объектом исследования в данной работе является двойной электрический слой на границе двух растворов: ионов окси-целлюлозы с Li^+ и Li^+ с Cl^- (рис. 1). Изначально создается система, состоящая из двух фаз растворов, между которыми находятся стенки на основе потенциала Леннарда-Джонса непроницаемые для ионов окси-целлюлозы. С помощью метода молекулярно-динамического моделирования симулируется эволюция системы, в ходе которой происходит перераспределение ионов в ячейке. На основе данных о положении ионов в равновесном состоянии вычисляется потенциал средней силы.

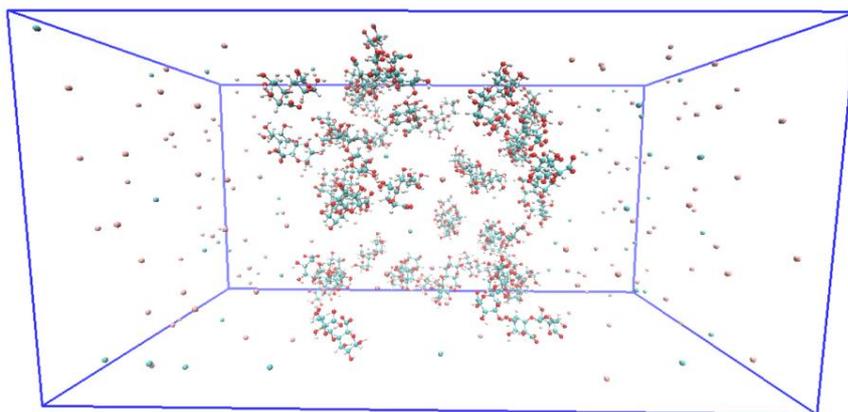


Рис. 1. Исследуемая ячейка двухфазной системы: окси-целлюлоза и ионный раствор. Молекулы воды не показаны

Структура водного раствора диоксана. Метод молекулярной динамики

И.К. Бакулин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Объединённый институт высоких температур РАН

Диоксан является широко распространенным промышленным растворителем, обладающим рядом важных свойств. Например, диоксан способен смешиваться с водой в любых мольных соотношениях. В силу этого, исследование структуры водного раствора диоксана представляет большой научный интерес как с экспериментальной, так и с теоретической точки зрения. Метод молекулярной динамики позволяет исследовать характеристики раствора, недоступные экспериментальным техникам, а также способен проверить соответствие существующих силовых полей экспериментальным результатам.

В настоящей работе исследуется структура водного раствора 1,4-диоксана в ряде молекулярно-динамических моделей: OPLS-AA [1], CHARMM36 [2], а также модель Смита [3]. Рассчитывается структурный фактор раствора и проводится сравнение полученных результатов с данными по рентгеновскому рассеянию на образцах раствора [4]. Проводится анализ кластеров молекул диоксана, формирующихся в растворе: рассчитывается размер кластера, количество молекул в кластере, а также его время жизни. Свойства раствора рассматриваются на всем диапазоне концентраций диоксана. Расчеты проводятся в программном пакете LAMMPS, анализ структуры и динамических свойств кластеров в системе осуществляется с помощью программных пакетов TRAVIS и MDAnalysis.

Качественная оценка структуры водного раствора диоксана с помощью визуализации была проведена в работе [5]. На рис. 1 приведен пример структуры 0.1-молярного раствора в модели Смита. Красной поверхностью изображен объем воды, зелеными кольцами изображены молекулы диоксана. В структуре видны группы, состоящие из 2–4 молекул диоксана, окруженные молекулами воды. Такие же кластеры были обнаружены в экспериментальном исследовании структуры раствора [4] при мольных долях диоксана менее 0.2. Аналогичный анализ структуры в модели CHARMM36 выявляет более гомогенную структуру, по сравнению с моделью Смита, что свидетельствует о большей степени гидрофильности молекул диоксана в модели CHARMM36, и находится в согласии с заниженной энтальпией растворения по сравнению с экспериментальными данными и расчетными значениями [5] в модели Смита.

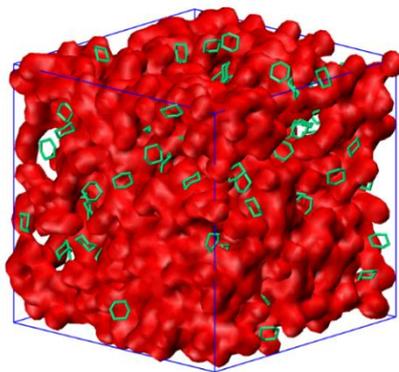


Рис. 1 Представление структуры водного раствора 1,4-диоксана с мольной долей 0.1 в модели Смита. Красная поверхность ограничивает объем воды, зеленые кольца представляют молекулы диоксана. Атомы водорода молекул диоксана опущены для лучшей визуализации

Расчеты проведены на суперкомпьютерах Фишер и Десмос ОИВТ РАН. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда по гранту #18-19-00734. Автор благодарит Кондратьюка Н.Д., Ланкина А.В. и Нормана Г.Э. за продуктивные научные дискуссии и наставления.

Литература

1. *Jorgensen W. L., Tirado-Rives J.* Potential energy functions for atomic-level simulations of water and organic and biomolecular systems // *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2005. V. 102. P. 6665–6670.
2. *Klada J. B. et al.* Update of the CHARMM all-atom additive force field for lipids: Validation on six lipid types // *J. Phys. Chem. B.* 2010. V. 114. P. 7830–7843.
3. *Smith G. D., Borodin O., Bedrov D.* A revised quantum chemistry-based potential for poly (ethylene oxide) and its oligomers in aqueous solution // *J. Comput. Chem.* 2002. V. 23. P. 1480–1488.
4. *Takamuku T. et al.* Structure and dynamics of 1,4-dioxane-water binary solutions studied by X-ray diffraction, mass spectrometry, and NMR relaxation // *J. Mol. Liq.* 1999. V. 83. P. 163–177.
5. *Bakulin I.K., Kondratyuk N.D., Lankin A.V., Norman G.E.* Properties of aqueous 1,4-dioxane solution via molecular dynamics // *J. Chem. Phys.* 2021. V. 155. P. 154501.

УДК 548.33

Поиск молекулярных кристаллов взрывчатых веществ с помощью потенциала COMPASS и эволюционного алгоритма USPEX

Д. М. Снитовец¹, И. А. Круглов^{1,2}, Н. Д. Кондратюк^{1,3,4}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

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

³Объединенный институт высоких температур РАН

⁴Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Получение новых взрывчатых веществ – опасная и трудоёмкая задача, поэтому для изучения структуры и свойств взрывчатых веществ активно используются методы компьютерного моделирования. Использование теории функционала плотности для оценки энергии при эволюционном поиске взрывчатых веществ осложнено ввиду большого количества атомов в элементарной ячейке молекулярного кристалла. Основная проблема выбора оптимального потенциала заключается в корректном учёте дисперсионного взаимодействия. Большое количество валентных параметров потенциала межатомного взаимодействия COMPASS в основном выводится из данных квантовой механики, что обеспечивает его высокую точность. Несвязывающие параметры электростатических и ван-дер-ваальсовых членов получаются путём комбинирования квантомеханических расчётов и подгонки экспериментальных свойств конденсированной фазы [1].

В данной работе был проведён поиск молекулярных кристаллов взрывчатых веществ пентаэритриттетранитрата (PETN) и тринитротолуола (TNT) с использованием эволюционного алгоритма USPEX [2, 3]. Релаксация структур осуществлялась при помощи потенциала COMPASS в рамках программного пакета LAMMPS. Энергии полученных молекулярных кристаллов пересчитаны с помощью теории функционала плотности с дисперсионными поправками (DFT-D3) в программном пакете VASP. Сравнение энергий полученных кристаллов показало хорошую применимость потенциала межатомного взаимодействия COMPASS для оценки энергии молекулярных кристаллов взрывчатых веществ при эволюционном поиске.

Литература

1. *Sun H.* COMPASS: an ab initio force-field optimized for condensed-phase applications overview with details on alkane and benzene compounds. *The Journal of Physical Chemistry B*, 1998. V. 102. N 38. P. 7338–7364.
2. *Glass C.W., Oganov A.R., Hansen N.* USPEX – Evolutionary crystal structure prediction. *Computer physics communications*, 2006. V. 175, N 11–12. P. 713–720.
3. *Zhu Q., Oganov A.R., Glass C.W., Stokes H.T.* Constrained evolutionary algorithm for structure prediction of molecular crystals: methodology and applications. *Acta Crystallographica Section B: Structural Science*, 2012. V. 68, N 3. P. 215–226.

Моделирование фильтрации двухкомпонентной смеси жидкости и идеального газа

С.Б. Лопес Висенс, В.В. Писарев

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рассмотрена задача о течении идеального газа (азот) и жидкости (пентан) через пористую среду, которое приближается уравнением Дарси

$$\mathbf{v}_i = -\frac{1}{\mu_i} \hat{K} \cdot f_i(s) \cdot \nabla P$$

где \hat{K} – коэффициент проницаемости f – удельная проницаемость, μ – динамическая вязкость, а s – газонасыщенность. В общем случае \hat{K} является тензором, зависящим от геометрии среды. Мы предполагаем изотропность среды, поэтому K – скаляр. Как первое приближение выбраны $f_1(s) = s^2$, $f_2(s) = (1-s)^2$.

Используется уравнение Тейта, чтобы связать плотность жидкости с давлением, и уравнение состояния идеального газа для азота.

Течение рассчитывается на основе уравнения неразрывности. Производные по пространству приближаются схемой конечных разностей второго порядка, а для интегрирования по времени применён явный метод предиктор-корректор по схеме Хойна.

Алгоритм:

1. Вычисление плотностей при помощи уравнений состояния.
2. Нахождение давления и газонасыщенности методом Ньютона-Рафсона из условия равенства давления газа и жидкости.
3. Вычисление скоростей законом Дарси.
4. Переход на следующий шаг по времени согласно численной схеме.

Исследуемая область: $\Omega = [0, 2] \times [0, 2]$

Стенки: $\partial\Omega_1 = \{(x, y) \in \partial\Omega : x = 0\} \cup \{(x, y) \in \partial\Omega : x = 2\} \cup \{(x, y) \in \partial\Omega : x \in [1, 2], y = 0\}$

Вход: $\partial\Omega_2 = \{(x, y) \in \partial\Omega : x \in [0, 1), y = 0\}$

Выход: $\partial\Omega_3 = \{(x, y) \in \partial\Omega : y = 2\}$

$\frac{\partial P}{\partial n} = 0, (x, y) \in \partial\Omega_1, P = P_{in}, (x, y) \in \partial\Omega_2, P = P_{out}, (x, y) \in \partial\Omega_3$

$\mathbf{v}_n = 0, (x, y) \in \partial\Omega_1$

Скорости определяются законом Дарси при $(x, y) \in \partial\Omega_2 \cup \partial\Omega_3$.

$P = P_{in}, (x, y) \in \partial\Omega_2, P = P_{out}, (x, y) \in \partial\Omega_3, P = P_0(x, y) \in \Omega, (\partial\Omega_2 \cup \partial\Omega_3)$

Начальные скорости определяются законом Дарси.

Для указанных начальных и граничных условий решается задача вытеснения смеси газа и жидкости обогащенной по газу смесью с большой газонасыщенностью.

Таблица 1. Параметры симуляции

Температура, T	298 K
Входное давление, P_{in}	$10^6 Pa$
Выходное давление, P_{out}	$10^5 Pa$
Пористость, ϕ	0.7
Удельная проницаемость, K	10^{-12}
Динамическая вязкость азота, μ_1	$1.8 \cdot 10^{-5} Pa \cdot s$
Динамическая вязкость пентана, μ_2	$2,14 \cdot 10^{-4} Pa \cdot s$
Молярная композиция на входе, ψ	0.9
Начальная молярная композиция, ψ_0	0.1

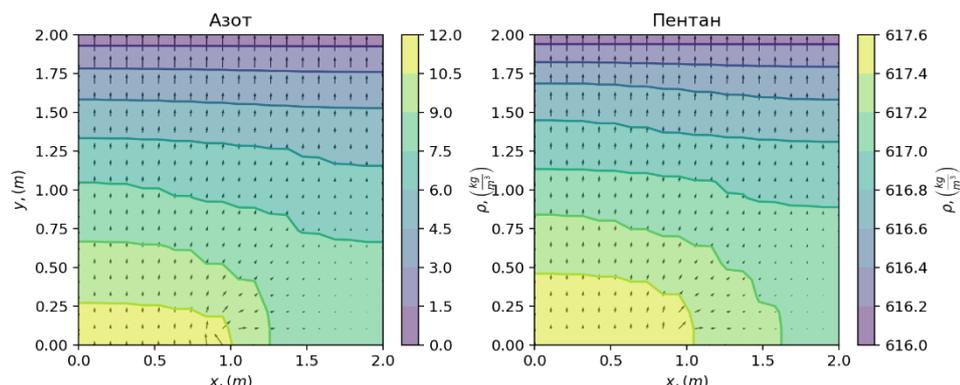


Рис. 1. Профиль плотности и поле скоростей для каждого компонента в момент времени $t = 500$ с

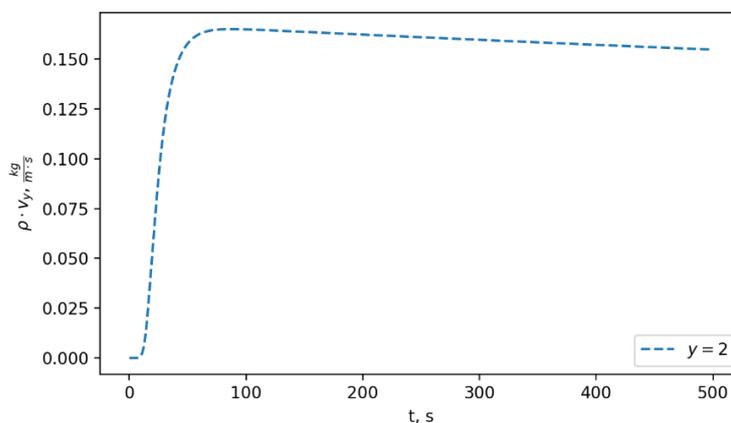


Рис. 2. Поток пентана через границу $y = 2$ (выход) в зависимости от времени

УДК 544.034

Предсказание транспортных свойств водных растворов сахаров методом молекулярной динамики

В.И. Дещеня

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Объединённый институт высоких температур РАН

Водные растворы сахаров имеют широкую область применения: они используются в процессах осмотической дегидратации, применяются при опреснении морской воды и ее очистке от примесей тяжёлых металлов. Важным методом таких исследований может быть метод молекулярной динамики, точность и достоверность результатов которого определяется точностью модели. В данной работе проводится анализ применимости силового поля OPLS-AA для моделирования водных растворов сахаров.

Для описания молекулярных связей в молекуле сахарозы использовался потенциал OPLS-AA [1] с коррекцией парциальных зарядов $1.14 \cdot \text{CM1A}$ [2, 3] на атомах. Для генерации топологии молекулы использовался веб-сервер LigParGen[4]. В качестве модели воды выбрана четырехточечная модель TIP4P/2005 [5], хорошо воспроизводящая экспериментальные значения коэффициентов вязкости [6] и диффузии [7]. Моделирование проводилось с помощью программного пакета LAMMPS с шагом по времени 1 фс.

В работе производится расчет температурных и концентрационных зависимостей плотности, коэффициентов вязкости и диффузии водного раствора сахарозы в диапазоне температур 273–343К с массовой долей сахара в растворе от 10% до 50%. Вычисление коэффициента вязкости происходит с помощью формул Грина–Кубо. Используется метод временной декомпозиции [8], в котором интеграл Грина–Кубо аппроксимируется двойной экспоненциальной функцией следующего вида:

$$\eta(t) = A\alpha\tau_1(1 - e^{-t/\tau_1}) + A(1 - \alpha)\tau_2(1 - e^{-t/\tau_2}),$$

где A , α , τ_1 и τ_2 – параметры. Расчет коэффициента диффузии происходит путем вычисления зависимости среднеквадратичного отклонения молекул от времени и применения формулы Эйнштейна-Смолуховского. Для корректного определения коэффициента исследуется влияние размерного эффекта, что требует вычисления коэффициента диффузии при различных размерах системы и экстраполяции к бесконечному размеру.

Производится сравнение полученных в ходе расчетов результатов с экспериментальными значениями [9–11]. Температурные зависимости плотности, вязкости и само-диффузии сахара в растворе хорошо воспроизводят экспериментальные данные. На рис. 1 представлена зависимость вязкости раствора при 10% концентрации сахара. Зависимости транспортных коэффициентов аппроксимируются аррениусовскими зависимостями, вычисляются энергии активации для каждой из исследуемых концентраций сахара.

Полученные температурные зависимости коэффициентов диффузии и вязкости используются для вычисления эффективного размера молекулы – гидродинамического радиуса. В предположении сферической формулы молекулы справедливо уравнение Стокса–Эйнштейна, связывающее коэффициенты диффузии и вязкости с температурой системы и радиусом молекулы:

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta R_h}$$

Расчёты проведены на суперкомпьютерах «Десмос» и «Фишер» ОИВТ РАН. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда по гранту № 18-19-00734. Автор выражает благодарность Норману Г.Э. и Ланкину А.В. за постановку задач и содействие во время работы, а также Кондратьюку Н.Д. за продуктивные обсуждения.

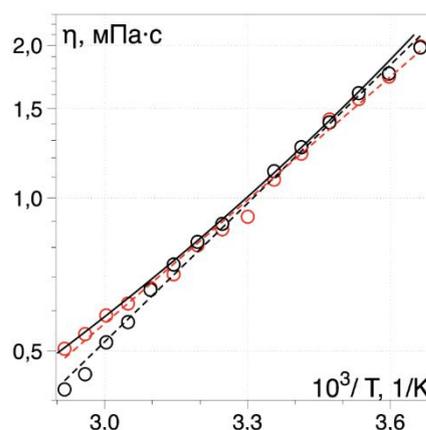


Рис. 1. Температурная зависимость вязкости водного раствора сахарозы. Красными кругами обозначены значения, полученные методом молекулярной динамики. Черными кругами – экспериментальные данные из работы [9]. Сплошной линией изображена экспериментальная кривая из работы [10]. Пунктирными линиями показаны аппроксимации точек уравнением Аррениуса

Литература

1. *Jorgensen W.L., Maxwell D.S., Tirado-Rives J.* Development and Testing of the OPLS All-Atom Force Field on Conformational Energetics and Properties of Organic Liquids // *Journal of the American Chemical Society*. 1996. V. 118, N 45. P. 11225–11236.
2. *Jorgensen W.L., Tirado-Rives J.* Potential energy functions for atomic-level simulations of water and organic and biomolecular systems // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. 2005 V. 102, N.19 P. 666–6670
3. *Dodda L.S., Vilseck J.Z., Tirado-Rives J., Jorgensen W.L.* 1.14* CM1A-LBCC: localized bond-charge corrected CM1A charges for condensed-phase simulations // *Journal of Physical Chemistry*. 2017. V. 121, N 15 P. 3864–3870
4. *Dodda L.S., Cabeza de Vaca I., Tirado-Rives J., Jorgensen W.L.* LigParGen web server: an automatic OPLS-AA parameter generator for organic ligands // *Nucleic Acids Research*. 2017. V. 45, N.W1 P. W33–W336
5. *Abascal J.L.F., Vega C.* A general purpose model for the condensed phases of water: TIP4P/2005 // *The Journal of Chemical Physics*. 2005. V. 123, N 23. P. 234505

6. *Gonzalez M.A., Abascal J.L.F.* The shear viscosity of rigid water models // *Journal of Physical Chemistry*. 2010. V. 132, N 9. P. 96101.
7. *Vega C., Abascal J.L.F., Conde M.M., Aragonés J.L.* What ice can teach us about water interactions: a critical comparison of the performance of different water models // *Faraday Discuss.* 2009. V. 141. P. 25–276.
8. *Zhang Y., Otani A., Maginn E.* Reliable Viscosity Calculation from Equilibrium Molecular Dynamics Simulations: A Time Decomposition Method // *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2015. V. 11, N 8. P. 353–3546
9. *Telis V.R.N., Telis-Romero J., Mazzotti H.B., Gabas A.L.* Viscosity of Aqueous Carbohydrate Solutions at Different Temperatures and Concentrations // *International Journal of Food Properties*. 2007. V. 10, N 1. P. 185–195.
10. *Rampp M., Buttersack C., Lüdemann H.-D.* c,T-Dependence of the viscosity and the self-diffusion coefficients in some aqueous carbohydrate solutions // *Carbohydrate Research*. 2000. V. 328. P. 561–572.
11. *Wagenbreth H., Toth H., Kozdon A., Emmerich A.* New measurements of the density of aqueous sucrose solutions. 1988. V. 98, N 2. P. 198–205.

УДК 538.913

Моделирование гидроксида алюминия

В.Г. Лукьянчук¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Гидроксид алюминия $\text{Al}(\text{OH})_3$ имеет множество применений, среди которых помимо прочего выделяется способность абсорбировать различные вещества из воды. Данное свойство гидроксида алюминия можно применить для добычи лития из воды, содержащей его соли.

Целью данной работы являлось получение компьютерной модели нужной кристаллической формы гидроксида алюминия, дальнейшая модификация которого способна к сорбции лития.

Было проведено моделирование с помощью программного пакета LAMMPS двух форм кристаллических решёток гидроксида алюминия, а именно триклинного гиббсита и байерита, исходные строения кристаллических решёток которых были взяты из базы данных The Materials Project [1]. Для моделирования взаимодействия был использован потенциал ClayFF [2]:

$$E_{\text{total}} = E_{\text{Coulombic}} + E_{\text{vdW}} + E_{\text{bond stretch}} + E_{\text{angle bend}}$$

$$E_{\text{Coulombic}} = k \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}},$$

$$E_{\text{vdW}} = \sum_{i \neq j} D_{0,ij} \left[\left(\frac{R_{0,ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_{0,ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right],$$

$$E_{\text{bond stretch}} = \sum_{\text{bonds}} k_1 (r_{ij} - r_0)^2,$$

$$E_{\text{angle bend}} = \sum_{\text{angles}} k_2 (\theta_{ijk} - \theta_0)^2$$

Здесь r_{ij} – расстояние между частицами, E_{total} – полная энергия, представленная в виде суммы кулоновской $E_{\text{Coulombic}}$, ван-дер-ваальсовской E_{vdW} энергий с константами взаимодействия $k, D_{0,ij}, R_{0,ij}$ и эффективными электрическими зарядами q_i, q_j , а также гармонических энергий $E_{\text{bond stretch}}$ и $E_{\text{angle bend}}$ для моделирования ковалентной связи в гидроксильной группе OH и угла изгиба Al-O-H с константами k_1, r_0 и k_2, θ_0 соответственно.

В результате полученные кристаллические структуры гиббсита и байерита сохранялись с течением времени и соответствовали реальным структурам [3], что говорит о возможности применения потенциала ClayFF для дальнейшего моделирования форм гидроксида алюминия и других гидратированных минералов.

Литература

1. *Jain A., Ong S.P., Hautier G., Chen W., Richards W.D., Dacek S., Cholia S., Gunter D., Skinner D., Ceder G., Persson K.A.* The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation // *APL Materials*, 2013, 1(1), 011002.
2. *Cygan, R. T., Liang, J. J., Kalinichev A. G.* Molecular Models of Hydroxide, Oxyhydroxide, and Clay Phases and the Development of a General Force Field // *J. Phys. Chem. B* 2004, 108, 1255–1266.
3. *Gale J.D., Rohl A.L., Milman V., Warren M.C.* An ab initio study of the structure and properties of aluminum hydroxide: gibbsite and bayerite // *J. Phys. Chem. B* 2001, 105, 10236–10242.

Секция электродинамики сложных систем и нанофотоники

УДК 539.192

Частично-секулярная аппроксимация для описания диссипации сильносвязанных квантовомеханических систем

И.В. Вовченко^{1,2}, В.Ю. Шишков^{1,2,3}, А.А. Зябловский^{1,2,3}, Е.С. Андрианов^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и прикладной электродинамики

³Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова

Задачи о релаксации квантовых систем помимо фундаментального интереса, представляют практический интерес: т.к. современные технологии позволяют манипулировать объектами на микро- и наномасштабах. В качестве примера можно привести управление квантовыми объектами при помощи плазмонных пинцетов, спектроскопию одиночных молекул, спектроскопию на основе гигантского комбинационного рассеяния (SERS) и пр.

Для описания релаксации квантовомеханических систем обычно выделяют подсистему, динамика которой интересна (кубит, пара кубитов, атом, молекула и т.п.), и её окружение (фотоны, фотоны и т.п.). Окружение называют *резервуаром*. В частных практически важных случаях можно предположить, что резервуар находится в термодинамическом равновесии (приближение Борна), и получить локальное по времени уравнение (приближение Маркова) [1]. Далее можно получить уравнение со слагаемыми, осциллирующими на разнице собственных частот системы (управляющее уравнение Блоха–Редфилда [2]). Однако данное уравнение достаточно сложно и требует дальнейшего упрощения.

Существует два основных подхода к упрощению данного уравнения. Первый называется *глобальным* (global approach или full secular approximation). Все осциллирующие слагаемые в уравнении Блоха–Редфилда усредняются по времени и обращаются в нуль. Таким образом, получается уравнение Горини–Косаковского–Сударшана–Линдблада [3]. Данный подход верен, когда скорости релаксации системы много меньше разниц между собственными частотами системы. Таким образом, для данного подхода необходимо знать собственные состояния и собственные частоты всей системы, что в случае многочастичных систем затруднительно.

Второй подход называется *локальным* (local approach). Систему разбивают на набор более простых взаимодействующих подсистем. Для каждой из них применяют глобальный подход и далее предполагают, что взаимодействие с другими подсистемами не приводит к изменению диссипационных слагаемых. Для данного подхода не нужно знать собственные частоты всей системы, достаточно знать собственные частоты каждой из подсистем. Такой подход не учитывает влияние взаимодействия на собственные частоты, что оправдано только если частота связи между подсистемами много меньше, чем скорости затухания каждой из подсистем.

Таким образом, оба подхода неприменимы в системах, где разница между собственными частотами порядка скоростей релаксации. Однако именно такие системы находят множество приложений в задачах сенсорики, фотоники, молекулярной физики, химии, сенсорики и лазерной физики. Отдельный интерес представляет наличие особой точки в пространстве параметров, т.к. локальный подход прогнозирует её наличие, в то время как глобальный говорит о её полном отсутствии. Однако вблизи особой точки скорости релаксации системы порядка разницы между собственными частотами системы. Таким образом, оба подхода выходят за границы своей применимости в этой области параметров.

В данной работе [4] построена модель частично-секулярной аппроксимации релаксации квантовых систем, призванная разрешить обозначенные выше проблемы. На примере двух связанных осцилляторов данная модель показывает асимптотическое приближение к результатам локального и гло-

бального подходов в пределах малых и больших разностей собственных частот системы, соответственно. Применима при любом соотношении скоростей релаксации к разнице между собственными частотами.

Литература

1. *Breuer H.P., Petruccione F.* The theory of open quantum systems // Oxford University Press, N.Y. (2002).
2. *May V., Kuhn O.* Charge and energy transfer dynamics in molecular systems // John Wiley & Sons, Morlenbach (2008).
3. *Gorini V., Kossakowski A., Sudarshan E.C.G.* Completely positive dynamical semigroups of N-level systems // J. Math. Phys. 17, 821 (1976).
4. *Вовченко И.В., Шишков В.Ю., Зябловский А.А., Андрианов Е.С.* Модель для описания релаксации квантовомеханических систем с близко лежащими уровнями энергий // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 114 1, 43–49 (2021).

УДК 538.945

Нематическая сверхпроводимость в топологических изоляторах, индуцированная гексагональными искажениями поверхности Ферми

Р.Ш. Акзянов^{1,2}, Д.А. Хохлов^{1,2}, А.Л. Рахманов^{1,2}

¹Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Несколько лет назад была экспериментально открыта нематическая сверхпроводимость в допированном топологическом изоляторе $A_xBi_2Se_3$, где допантом А может быть стронций, медь или ниобий. Данный векторный параметр порядка является спин-триплетным и спонтанно нарушает вращательную симметрию кристалла [1]. Наша работа объясняет, почему именно нематический параметр порядка реализуется в данном классе систем.

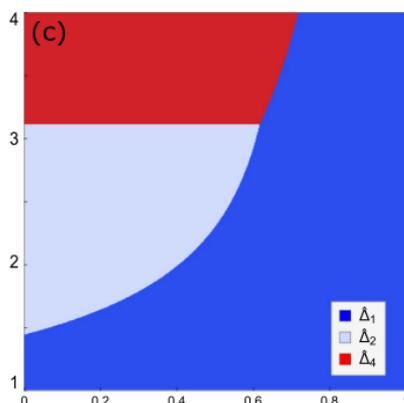


Рис. 5 Фазовая диаграмма с различными сверхпроводящими фазами. По вертикальной оси отложен химический потенциал в единицах одноэлектронной щели в спектре. По горизонтальной оси отложено относительное электрон-электронное притяжение U/V .

Цвет области указывает на наиболее выгодный тип спаривания

Мы моделировали исследуемую систему, используя низкоэнергетический гамильтониан электронов. Учтены все члены, пропорциональные нулевой и первой степеням импульса. Кроме того, в модель были включены кубические по импульсу члены, приводящие к гексагональным искажениям поверхности Ферми. За возникновение сверхпроводимости отвечает притяжение электронов с одной орбитали U и с различных орбиталей V . Далее, мы поочередно включали в модель различные сверхпроводящие параметры порядка и вычисляли их критические температуры в зависимости от энергии Ферми, электрон-электронного притяжения и степени гексагональных искажений поверхности Ферми. Были исследованы: четный синглетный (1), скалярный триплетный (2), нечетный синглетный (3) и нематический (4) параметры порядка. Основным состоянием является параметр порядка с наибольшей критической температурой. Полученная фазовая диаграмма была проверена с помощью вычисления

свободной энергии при нулевой температуре. Оказалось, что нематическая фаза становится основным состоянием при достаточно высокой энергии Ферми и наличии гексагональных искажений, см. рис. 1.

Кроме того, мы вычислили отношение нематического параметра порядка при нулевой температуре к критической температуре. Типичное значение данного отношения составляет 2,1. В системах С синглетным сверхпроводящим параметром порядка данное отношение равняется 1,76.

Работа проведена при поддержке Российского Научного Фонда,
в рамках гранта № 20-72-00030.

Литература

1. *Yonezawa S.* Nematic superconductivity in doped Bi₂Se₃ topological superconductors // *Condensed Matter*. 2019. Т. 4, № 1. С. 2.

УДК 530.145

Частотная фильтрация излучения от некогерентно накачиваемого однофотонного источника

И.В. Панюков¹, В.Ю. Шишков^{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

В последние годы однофотонные источники света, для которых функция когерентности второго порядка $g^{(2)}(0)$ равна нулю, привлекают большой интерес. Это связано с их применением в квантовых вычислениях [1] и в квантовой криптографии [2]. Простейшим примером однофотонного источника является двухуровневый атом с ненулевым дипольным моментом перехода между уровнями [3].

С практической точки зрения интерес представляет управление скоростью и направлением излучения однофотонного источника при одновременном сохранении нулевого значения $g^{(2)}(0)$. Это может быть реализовано за счет использования различных интерфейсов, таких как плазмонные наноантенны, диэлектрические микро- и наноструктуры [4]. Однако плазмонные наноантенны вносят искажения в спектр испускаемого света [5], то есть осуществляют эффективную частотную фильтрацию излучения. До недавнего времени отсутствовали надежные методы описания статистики света, прошедшего через спектральные фильтры, и анализ корреляций интенсивности фильтрованного света был возможен только для ограниченного числа задач.

В настоящей работе мы исследуем статистические свойства света, испускаемого однофотонным источником, который представляет собой некогерентно накачиваемую двухуровневую систему (ДУС). Применяя квантовую теорему регрессии для ненормально упорядоченных корреляционных функций [6], мы получаем аналитическое выражение для $g^{(2)}(0)$ света, излученного ДУС и прошедшего через спектральный фильтр. Мы показываем, что сужение ширины полосового фильтра неизбежно приводит к увеличению $g^{(2)}(0)$. Мы также находим $g^{(2)}(\tau)$ и демонстрируем, что определенные спектральные фильтры приводят к немотонной зависимости $g^{(2)}(\tau)$. Результаты открывают возможность контроля над статистикой излученного света с помощью спектрального фильтра, что может найти приложение в квантовых коммуникациях и в квантовой криптографии.

Литература

2. *O'Brien J.L.* Optical quantum computing // *Science*. 2007. V. 318, N 5856. P. 1567–1570.
3. *Hughes R.J. et al.* Quantum cryptography // *Contemporary Physics*. 1995. V. 36, N 3. P. 149–163.
4. *Scully M.O., Zubairy M.S.* Quantum optics. 1999.
5. *Lodahl P., Mahmoodian S., Stobbe S.* Interfacing single photons and single quantum dots with photonic nanostructures // *Reviews of Modern Physics*. 2015. V. 87, N 2. P. 347.
6. *Ming T. et al.* Plasmon-controlled fluorescence: beyond the intensity enhancement // *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2012. V. 3, N 2. P. 191–202.
7. *Bloch P. D., Mølmer K.* Quantum regression theorem for out-of-time-ordered correlation functions // *Physical Review A*. 2019. V. 99, N 3. P. 033816.

Магнитно-электронная неустойчивость графена на ферромагнитной подложке*Д.Н. Дресвянкин¹, А.В. Рожков²*¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Графен – двумерная углеродная структура с гексагональной структурой. Эта углеродная структура считается многообещающим объектом исследований в различных областях физики, например в спинтронике, так как демонстрирует ряд интересных физических свойств. Одним из перспективных способов управления спиновыми свойствами графена является помещение графенового образца на магнитную подложку. Это делает вопрос об исследовании устойчивости подобной системы актуальным для современной физики конденсированного состояния. В работе будет теоретически показано, что графен, помещённый на ферромагнитную подложку, демонстрирует «кооперативную» магнитно-электронную неустойчивость. Эта неустойчивость выражается в том, что при определенных условиях в системе графен-субстрат пропадает идеальная однородная ферромагнитная намагниченность, и у вектора намагниченности появляется подкашивающая деформация. Мы покажем, что возникновение подкашивающей деформации идеального ферромагнитного упорядочения в подложке приводит к понижению энергии электронов в графене. Данное понижение всегда будет компенсировать положительный вклад в энергию системы, связанный с возникновением подкоса намагниченности в субстрате. В случае идеального магнитного ферромагнитного упорядочения графен переходит в ферромагнитное состояние. В случае, когда в системе имеется подкос, в энергетическом спектре появляется щель, то есть графен переходит в диэлектрическое состояние. Величина этой щели определяется следующей формулой:

$$\Delta = 4h \exp\left(\frac{W}{h} - \frac{\pi^3 t^2 J}{4\sqrt{3}\tau^2 h}\right), \quad (1)$$

где h – энергия зеемановского расщепления, W – ширина зоны, t – интеграл перескока в графене, J – обменный интеграл материала подложки. Величина τ , в свою очередь, связывает намагниченность в подложке с энергетическим вкладом обменного взаимодействия в гамильтониан графена и определяется следующей формулой:

$$h = \tau m. \quad (2)$$

Для простоты мы полагали величину намагниченности безразмерной и по модулю равной единице. В таком случае величина τ численно совпадает с величиной h и примерно равняется 6×10^{-3} эВ, что следует из экспериментальной статьи [1]. Опираясь на данные из этой же статьи, мы оценили величину обменного интеграла J в 10^{-2} эВ. Величины W и t имеют порядок 1 эВ [2, 3]. Подставляя эти значения, мы получаем незначительную щель порядка 10^{-3} К. Экспериментальное обнаружение столь малой щели представляется затруднительным, но сам факт наличия магнитно-электронной неустойчивости не исчезает. Стоит также принять во внимание, что в наших расчетах не учитывалось электрон-электронное взаимодействие, учет которого может повысить значение щели. Стоит также отметить, что полученные результаты применимы к любому двумерному дираковскому материалу, поэтому если в будущем будут получены подобные материалы с меньшим интегралом перескока, то магнитно-электронная неустойчивость будет проявлять себя более ярким образом.

Литература

1. Peng Wei, Sunwoo Lee, Florian Lemaitre, Lucas Pinel, Davide Cutaia, Wujonn Cha, Ferhat Katmis, Yu Zhu, Donald Heiman, James Hone, Jagadeesh S. Moodera, Ching-Tzu Chen Strong interfacial exchange field in the graphene/EuS heterostructure // Nature Materials 15, 711 (2016).
2. Rozhkov A. V., Sboychakov A. L., Rakhmanov A.L., Franco Nori Electronic properties of graphene-based bilayer systems // Physics Reports 648, 1 (2016).
3. Klaus Zollner, Martin Gmitra, Tobias Frank, Jaroslav Fabian Theory of proximity-induced exchange coupling in graphene on hBN/(Co/Ni) // Physical Review B 94, 155441 (2016).

Двухпараметрический сенсор водорода на основе дифракционной решетки из палладия**Ю.В. Юанов**

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Предложен метод детектирования водорода, основанный на одновременном учете изменения диэлектрической проницаемости [1] и объема палладиевых элементов сенсора [2]. Рассматриваемая система состоит из периодической двумерной структуры на основе палладиевых полос на кварцевой подложке.

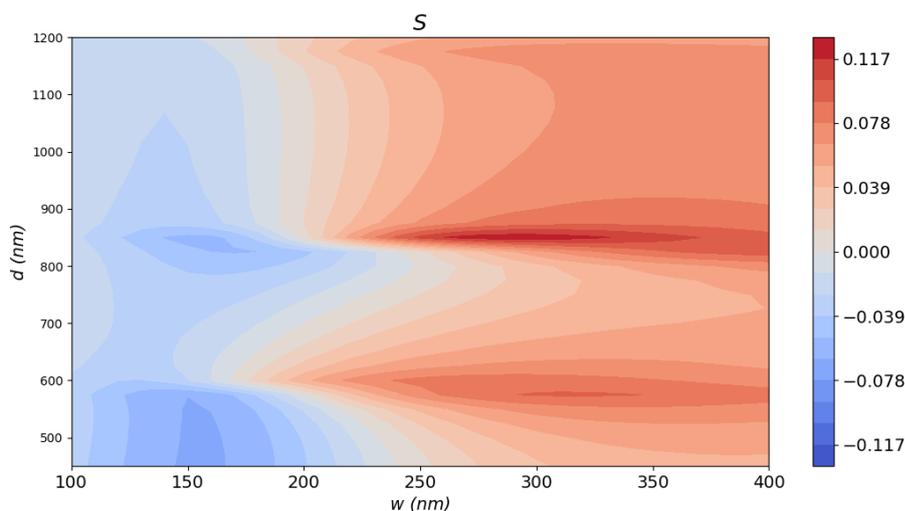


Рис. 1. Чувствительность сенсора S в зависимости от ширины полосы w и периода системы

Геометрия сечения представляет собой трапецию с фиксированным углом наклона и высотой, но переменной шириной основания и величиной скважности. Продемонстрировано обучение алгоритма, основанного на методе главных компонент, который позволяет определить концентрацию водорода в атмосфере как при малых (до фазового перехода [3]), так и больших её значениях. Проведена оптимизация параметров сенсора, а именно, показано, что для рассматриваемого диапазона геометрических параметров присутствует несколько оптимальных конфигураций (рис. 1), каждой из которых соответствует поле, локализованное в той или иной части сенсора. Дана интерпретация каждой оптимальной конфигурации с точки зрения существования собственных мод.

Литература

1. Von Rottkay, K., M. Rubin, and P. Duine, Refractive index changes of Pd-coated magnesium lanthanide switchable mirrors upon hydrogen insertion // Journal of applied physics, 1999. 85(1): P. 408–413.
2. Corso, A.J., et al. In situ real-time investigation of hydrogen-induced structural and optical changes in palladium thin films // Journal of Alloys and Compounds, 2017. 704: P. 303–310.
3. Griessen, R., N. Strohhfeldt, and H. Giessen, Thermodynamics of the hybrid interaction of hydrogen with palladium nanoparticles // Nature materials. 2016. 15(3): P. 311–317.

Гибридизация плазмонных, коллективных и Ми-подобных резонансов в кремний-никелевых нанорешетках

К.А. Мамян, А.Ю. Фролов, В.В. Попов, А.А. Федянин

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

При взаимодействии света с гибридными наноструктурами наблюдается множество интересных эффектов, связанных с возбуждением различных по типу оптических резонансов. С одной стороны, в кремниевых наноструктурах возможно возбуждение мультипольных резонансов рассеяния, обладающих малыми потерями на поглощение в видимом и ближнем ИК-диапазонах (резонансов типа Ми). С другой, при добавлении металлических компонент в системе могут возбуждаться плазмонные резонансы – локализованные плазмоны и поверхностные плазмон-поляритоны, распространяющиеся вдоль границы раздела «металл-диэлектрик». В гибридной структуре эти и другие резонансы могут накладываться друг на друга, образуя т.н. связанные состояния в континууме [1].

Для возбуждения плазмонов на границе металл-диэлектрик необходимо достичь условия фазового синхронизма между волновым вектором падающего света и волновым вектором плазмона. Это можно сделать с помощью нанесения на поверхность металла нанорешетки из кремния. При падении света один из дифракционных порядков может распространяться вдоль поверхности решетки (аномалия Рэлея) и возбуждать поверхностный плазмон. Условие запишется следующим образом:

$$k_0 \sin \theta + m \frac{2\pi}{d} = \text{Re}(k_p) = k_0 \text{Re} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}} \right)$$

где k_0 – волновое число падающего света, θ – угол падения, m – целое число, k_p – константа распространения плазмона, ε_1 и ε_2 – диэлектрические проницаемости металла и диэлектрика.

Наличие кремниевых нанонитей дополнительно приводит к возбуждению Ми-подобных Фабри–Перо резонансов, локализованных внутри самих нанонитей.

В данной работе рассмотрена структура в виде нанорешетки, состоящей из кремниевых нанонитей прямоугольного сечения на никелевой подложке (схема на рис. 1а). Кремний выбран в силу его высокого показателя преломления и малых оптических потерь в рабочем диапазоне (видимый – ближний ИК), а никель ввиду его ферромагнитных свойств, которые в дальнейшем могут усилить магнито-оптический отклик образца.

В программной среде Ansys Lumerical 2021 R1.4 была создана модель данной структуры и с помощью численного метода FDTD (метод конечных разностей во временной области) проведен ряд предварительных расчетов для определения оптимальных (с точки зрения наблюдения гибридных резонансов) параметров решетки. По полученным расчетным данным были созданы экспериментальные образцы.

В эксперименте измерялись спектры отражения образцов при изменении угла падения от 5° до 55° с шагов в 5° . Наибольший интерес представляет образец со следующими параметрами: период нанонитей 703 нм, их высота – 180 нм, ширина – 425 нм. На рис. 1б для него представлены экспериментальный и расчетный спектры отражения при угле падения в 10° , а на рис. 2 – ближнепольное распределение магнитного поля. По последнему можно судить, что на длине волны $\lambda = 686$ нм возбуждается резонанс типа Фабри–Перо порядка TM_{12} , поскольку у него две пучности магнитного поля по вертикали и одна по горизонтали. В области $\lambda = 586$ нм возбуждается плазмонный резонанс, о чем свидетельствует локализация поля на границе раздела никель/воздух; слабая локализация магнитного поля на границе раздела никель-воздух при $\lambda = 825$ нм показывает, что плазмон не возбуждается, несмотря на наличие максимума в отражении. Последний объясняется дифракционным связыванием резонансов типа Фабри–Перо TM_{12} в отдельных нанонитях (коллективный решеточный резонанс [2]).

На рис. 3 построены двумерная расчётная (а) и экспериментальная (б) зависимости коэффициента отражения от угла падения и длины волны. На расчетный график также нанесены кривые дисперсии для поверхностных плазмонов и кривые аномалии Рэлея. Видно, что ширина линии, отвечающей возбуждению резонанса типа Фабри–Перо (это провал коэффициента отражения в области длин волн 650-750 нм), уменьшается в месте пересечения с плазмонным резонансом порядка +1 и коллективным

резонансом в области 825 нм, что свидетельствует об увеличении добротности по сравнению с отдельным TM_{12} резонансом.

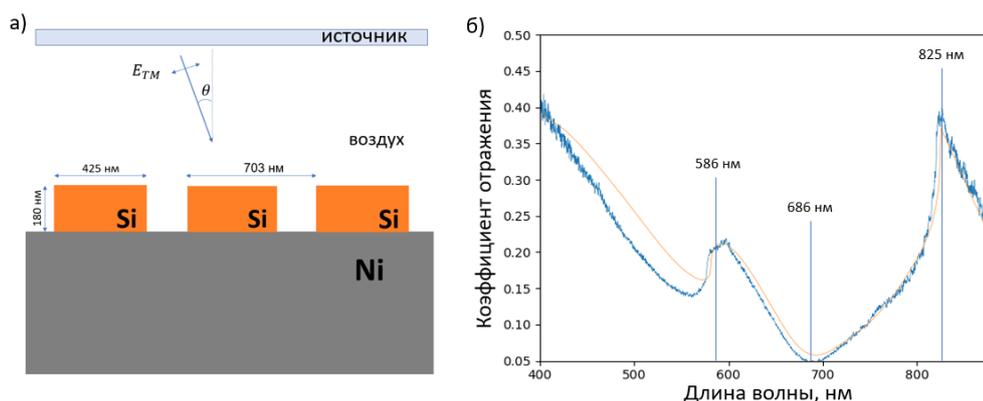


Рис. 1. Схема исследуемого образца (а). Экспериментальный (синяя кривая) и расчетный (оранжевая кривая) спектры коэффициента отражения при угле падения в 10° (б)

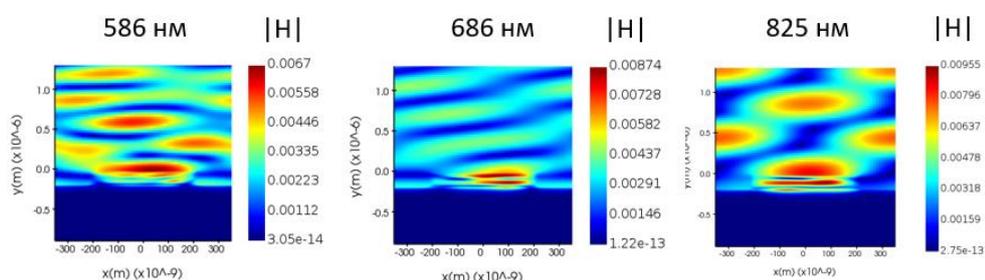


Рис. 2. Распределение магнитного поля $|H|$ на длинах волн $\lambda=586$ нм, $\lambda=686$ нм, $\lambda=825$ нм

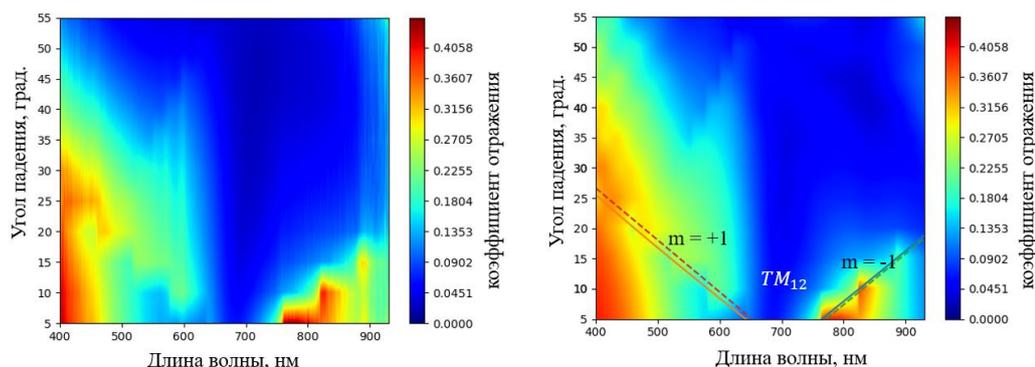


Рис. 3. Угловые зависимости спектров коэффициента отражения: эксперимент (слева) и расчет (справа)

Литература

1. Joseph S., Sarkar S., Khan S., Joseph J. Exploring the optical bound state in the continuum in a dielectric grating coupled plasmonic system // *Advanced Optical Materials*. 2021. V. 9. P. 1895.
2. Kravets V. G., Kabashin A. V., Barnes W.L., Grigorenko A.N. Plasmonic surface lattice resonances: a review of properties and applications // *Chemical Reviews*. 2018. V. 118. P. 5912.

УДК 537.874.4

Рассеяние электромагнитной волны сферическими частицами с высоким коэффициентом преломления

М.М. Бухарин, А.А. Башарин

НИТУ МИСиС

(Национальный исследовательский технологический университет МИСиС)

В данной работе была исследована сферическая частица с диэлектрической проницаемостью $\epsilon = 150$ и радиусом $a = 6.25$ нм, $b = 9.75$ нм, рассеивающая электромагнитную волну в боковом

направлении. С помощью экспериментов в безэховой камере были выявлены высокочастотные резонансы в диапазоне частот от 1 ГГц до 6 ГГц и измерена ЭПР. Методом мультипольного разложения были объяснены диаграммы направленности на пиковых частотах, было установлено, что основным вклад в рассеяние электромагнитной волны дают электрический диполь и магнитный квадруполь. Энергию рассеянной волны можно запасти, а затем отдать одним мощным импульсом, изменив диаграмму направленности с помощью активных материалов. Этот эффект можно использовать при создании плоских лазеров.

Мультипольное разложение – это метод, с помощью которого можно разложить электромагнитное поле на простые электрические и магнитные дипольные моменты и моменты более высокого порядка, что в дальнейшем упростит анализ.

$$E = \frac{k^2}{4\pi R \epsilon_0} e^{ikR} \left[\mathbf{n} \times (\mathbf{p} + ik\mathbf{T}^{(e)}) \times \mathbf{n} \right] + \frac{ik}{2} [\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{Q}^{(e)}) \cdot \mathbf{n}] + \frac{1}{c} [\mathbf{m} \times \mathbf{n}] + \frac{ik}{2c} [\mathbf{n} \times (\mathbf{Q}^{(m)} \cdot \mathbf{n})] \quad (1)$$

$$\mathbf{J} = -i\omega\epsilon_0(n^2 - 1)\mathbf{E} \quad (2)$$

$$\mathbf{p} = \frac{i}{\omega} \int \mathbf{J} d\mathbf{r}, \quad \mathbf{m} = \frac{1}{2} \int (\mathbf{r} \times \mathbf{J}) d\mathbf{r} \quad (3)$$

$$Q_{\alpha\beta}^{(e)} = \int [3(r_\beta J_\alpha + r_\alpha J_\beta) - 2(\mathbf{r} \cdot \mathbf{J})\delta_{\alpha\beta}] d\mathbf{r}, \quad Q_{\alpha\beta}^{(m)} = \int [r_\alpha (\mathbf{r} \times \mathbf{J})_\beta + r_\beta (\mathbf{r} \times \mathbf{J})_\alpha] d\mathbf{r} \quad (4)$$

Формула (1) представляет собой неполное разложение электрического поля по мультиполям, здесь соответственно k – волновое число, \mathbf{R} – радиус вектор, \mathbf{p} – электрический диполь, \mathbf{T} – тороидальный диполь, \mathbf{m} – магнитный диполь, $\mathbf{Q}^{(e)}$ – электрический квадруполь, $\mathbf{Q}^{(m)}$ – магнитный квадруполь. Для того чтобы найти электрические и магнитные моменты, необходимо воспользоваться формулами (3) и (4), здесь \mathbf{J} – плотность тока, которую можно посчитать с помощью формулы (2), где ω – циклическая частота волны, ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, n – коэффициент преломления, в данном случае $n = \sqrt{\mu\epsilon} = \sqrt{150}$.

На рис. 1 изображены проекции диаграмм направленности рассеянной электромагнитной волны на разные плоскости в сравнении с теоретическими расчетами.

В результате расчетов вкладов мультиполей (рис. 2), становится ясно, что резонансный пик представляет собой интерференцию электрического диполя и магнитного квадруполь. Диаграммы направленности, полученные с помощью построения излучений этих моментов, согласуются с экспериментальными данными.

Выводы. Это уникальное свойство можно использовать для перенаправления энергии, что позволит создать высокоэффективный плоский лазер, который будет работать за счет запасенной энергии магнитного резонанса.

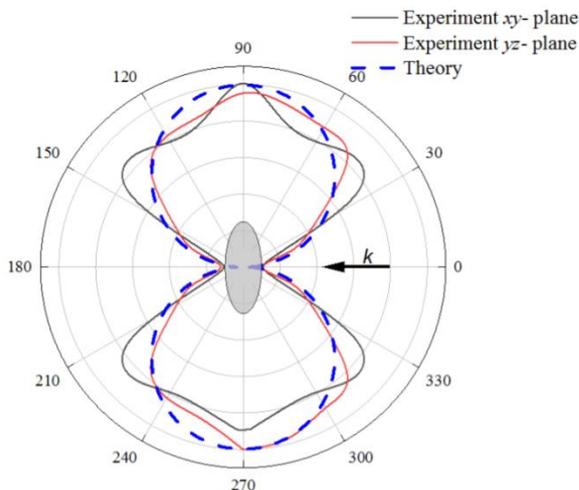


Рис. 1. Экспериментальные данные рассеяния на 2.18 ГГц

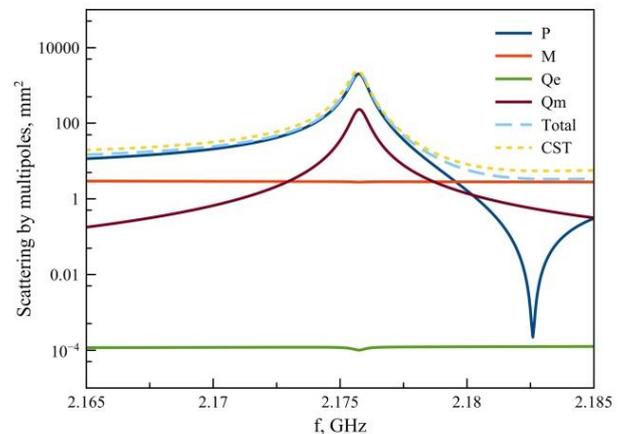


Рис. 2. Мультипольное разложение резонанса в сравнении с CST

Литература

1. Savinov V., Fedotov V. A. and Zheludev N.I. Toroidal dipolar excitation and macroscopic electromagnetic properties of metamaterials // Phys. Rev. B 89, 205112. Published 14 May 2014.
2. Andrey B. Evlyukhin A., Boris N. Chichkov. Multipole decompositions for directional light scattering // PHYSICAL REVIEW B 100, 125415 (2019).
3. Tatsuki Hinamoto and Minoru Fujii. MENP: An Open-Source MATLAB Implementation of Multipole Expansion for Applications in Nanophotonics // Department of Electrical and Electronic Engineering, Graduate School of Engineering, Kobe University, Kobe 657-8501, Japan.
4. Bukharin Mikhail M., Pecherkin Vladimir Ya., Ospanova Anar K., Il'in Vladimir B., Vasilyak Leonid M., Basharin Alexey A., Luk'yanchuk Boris. Transverse Kerker Effect in All-Dielectric Spheroidal Particles // DOI: 10.21203/rs.3.rs-947900/v1.

УДК 538.945

Вихрь Абрикосова и спиновый вихрь в легированном топологическом изоляторе

А.В. Капранов¹, А.Л.Рахманов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

В последние несколько лет получено множество доказательств существования нематической сверхпроводимости. В легированных топологических изоляторах, таких как $A_xBi_2Se_3$, где $A=Cu, Nb, Sr$, сверхпроводящий параметр порядка является двухкомпонентным вектором с «нематической» симметрией, а электроны имеют триплетное по спину спаривание, которое обуславливает целый ряд необычных свойств таких сверхпроводников, которые принято называть топологическими нематическими сверхпроводниками [1].

Существует множество интересных физических явлений, наблюдающихся в топологических изоляторах. Например, гигантские спиновые токи, поверхностные андреевские уровни, аномальный квантовый эффект Холла. Нематическая сверхпроводимость имеет нетривиальную связь с деформацией. Эта связь экспериментально наблюдается в высококачественных монокристаллах как анизотропия верхнего критического поля в базальной кристаллической плоскости, которая зависит от знака деформации кристалла. Нами предсказано возникновение спонтанной деформации при переходе образца в сверхпроводящее состояние [2].

Допированные топологические изоляторы – сверхпроводники второго рода, и в магнитном поле в них существуют вихри Абрикосова. Кроме того, в них возможен и другой тип вихрей. В работе [3] показано, что при деформации топологического сверхпроводника в нем может появиться спиновый вихрь с локализованной рядом с его кором парой Майорана Крамерса.

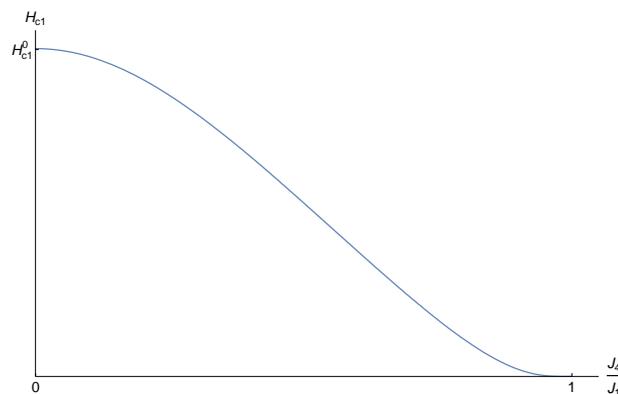


Рис. 1. Нижнее критическое поле вихря, полученное путем численного интегрирования уравнений ГЛ. Поле H_{c1} нормировано на нижнее критическое поле $H_{c1}^{(0)}$ «обычного» сверхпроводника

Теория Гинзбурга–Ландау (ГЛ) позволяет успешно описать макроскопические свойства топологической сверхпроводимости с векторным параметром порядка $\eta = (\eta_1, \eta_2)$. Мы рассматриваем эффекты, связанные с возникновением и взаимодействием вихрей в нематическом сверхпроводнике в рамках

теории ГЛ, учитывающей специфическую симметрию параметра порядка. Топологический сверхпроводник является сверхпроводником второго рода с параметром ГЛ, много большим единицы, и мы работаем в рамках так называемого *лондоновского приближения*. Решая уравнения ГЛ, мы получили нижнее критическое поле (рис. 1) и линии тока вихря вокруг Абрикосова (рис. 2). Также мы показали, что вихрь Абрикосова имеет нетривиальную связь с деформацией, так как в зависимости от знака деформации поворачивается вектор нематичности $\eta/|\eta|$. Предполагая, что в образце существует вихрь Абрикосова и спиновый вихрь, мы легко можем понять, что они будут взаимодействовать через деформацию сверхпроводника. Мы показали, что с точки зрения термодинамики вихрям выгодно притягиваться и иметь общий кор.

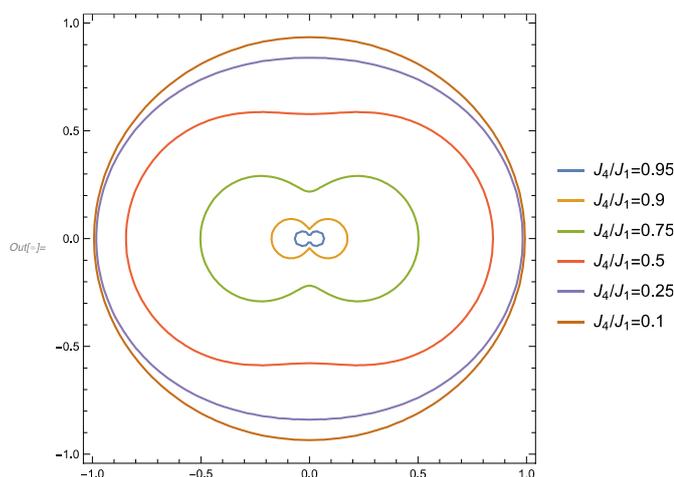


Рис. 2. Линии тока вихря в зависимости от отношения феноменологических коэффициентов ГЛ $J_{4,4}$ для нематического сверхпроводника

Литература

1. *Fu L. and Berg E.*, Odd-Parity Topological Superconductors: Theory and Application to $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ // *Phys. Rev. Lett.* 105, 097001 (2010).
2. *Akzyanov R.S., Kapranov A.V., and Rakhmanov A.L.* Spontaneous strain and magnetization in doped topological insulators with nematic and chiral superconductivity // *Phys. Rev. B* 102, 100505(R) (2020).
3. *Akzyanov R.S. and Rakhmanov A.L.* Strain-induced spin vortex and Majorana Kramers pairs in doped topological insulators with nematic superconductivity // *Phys. Rev. B* 104, 094511 (2021).

Научное издание

ТРУДЫ 64-й ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ МФТИ

29 ноября – 03 декабря 2021 года

ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА

Составители:

К. С. Слободчук, А. В. Гец

Редактор *Н.Е. Кобзева*

Корректоры: *Н.Е. Кобзева, В.А. Дружинина*

Верстка: *Н.Е. Кобзева*

Подписано в печать 20.12.2021. Формат 60 × 84 ¹/₈. Усл. печ. л. 68,25 п.л.

Тираж 70 экз. Заказ № 81.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»

141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9

E-mail: rio@mipt.ru

ISBN 978-5-7417-0785-2



9 785741 707852 >

Контактная информация оргкомитета конференции:

117303, г. Москва, ул. Керченская, д. 1А, корп. 1

+7 498 744-65-52

conf@mipt.ru

Официальный сайт конференции:

conf.mipt.ru