



**65**  
ВСЕРОССИЙСКАЯ  
НАУЧНАЯ  
КОНФЕРЕНЦИЯ  
МФТИ

Министерство науки  
и высшего образования РФ

Московский  
физико-технический институт  
(национальный исследовательский  
университет)

**приоритет2030<sup>^</sup>**

Лидерами становятся

ТРУДЫ  
65-й Всероссийской  
научной конференции  
МФТИ в честь 115-летия  
Л.Д. Ландау

**ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ  
И ПРИКЛАДНАЯ  
ФИЗИКА**

Москва  
Долгопрудный  
Жуковский  
2023



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

## **ТРУДЫ**

**65-й Всероссийской научной конференции МФТИ  
в честь 115-летия Л. Д. Ландау**

**3–8 апреля 2023 г.**

**ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА**

Москва  
ФИЗМАТКНИГА  
2023

УДК 53  
ББК 22.3  
Т78

**Т78 Труды 65-й Всероссийской научной конференции МФТИ в честь 115-летия Л.Д.Ландау, 3–8 апреля 2023 г. Фундаментальная и прикладная физика. — М: Физматкнига, 2023. — 584 с. ISBN 978-5-89155-387-3.**

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.

*Научное издание*

**Труды 65-й Всероссийской научной конференции МФТИ в честь 115-летия Л.Д.Ландау, 3–8 апреля 2023 г. Фундаментальная и прикладная физика**

Издательство «Физматкнига»  
Тел. (499) 390-51-38  
[www.fizmatkniga.org](http://www.fizmatkniga.org)

Подписано в печать 20.11.2023. Формат 60×84/8. Объем 67 усл. печ. л.  
Печать цифровая. Тираж 20 экз.

Отпечатано в полном соответствии с качеством предоставленных материалов в ООО «Фотоэксперт».  
109316, г. Москва, Волгоградский проспект, д. 42, корп. 5, эт. 1, пом. I, ком. 6.3-23Н

**ISBN 978-5-89155-387-3**



© Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», 2023

# ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ .....	25
ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ .....	26
СЕКЦИЯ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ .....	27
Проект нового Нуклотрона (JINR) .....	27
<i>Е. Д. Цыплаков, Ю. Н. Филатов</i>	
Оптимизация параметров импульсной последовательности КПМГ для задач ЯМР-метабономики .....	29
<i>Д. А. Федоров, А. М. Перепухов, А. В. Максимычев</i>	
Моделирование кинетики энергообменных процессов в плазме Ag/He .....	30
<i>Р. А. Курамышин, А. П. Торбин, М. И. Свистун, М. В. Загидуллин, А. К. Чернышов, П. А. Михеев</i>	
Применение методов ЯМР-спектроскопии высокого разрешения для анализа молекулярного строения новых Р, S-бидентатных амидофосфитных лигандов .....	32
<i>И. В. Чуцелкин, Я. П. Битяк, Д. А. Федоров, А. М. Перепухов, А. В. Максимычев</i>	
Конформация молекул полимеров в растворах для диффузионной ЯМР-спектроскопии .....	33
<i>А. Р. Пашутин, А. М. Перепухов, В. А. Иванова, Л. И. Меньшиков, П. Л. Меньшиков, А. В. Максимычев</i>	
Поверхностная потенциальная энергия в вязкой жидкости .....	35
<i>К. Ю. Лапина</i>	
Определение компонентного состава и диффузионных характеристик смесей блок-сополимеров с гомополимерами методами спектроскопии ЯМР .....	36
<i>В. А. Иванова, А. М. Перепухов, Л. И. Меньшиков, П. Л. Меньшиков, А. В. Максимычев, Ю. А. Пучкова, Н. Г. Седуш, С. Н. Чвалун</i>	
Изучение возможности восстановления гиперонов в эксперименте VM@N .....	37
<i>Р. К. Барак, С. П. Мерц</i>	
Аналитическое описание формы гидравлического прыжка .....	39
<i>А. Д. Сухов, А. Г. Петров</i>	
Расчетные методы восполнения недостающих данных о стратегических вооружениях США .....	40
<i>А. В. Кубышкин, И. Н. Белокоп, В. Г. Худовердов</i>	
Наведенное поглощение лазерного излучения наносекундной длительности в области полосы поглощения порфирина цинка .....	43
<i>А. Э. Калмыков, Л. М. Колдунов, М. Ф. Колдунов, А. А. Корнева</i>	
СЕКЦИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ .....	44
Рождение пентакварков в слабых распадах прелестных барионов .....	44
<i>М. М. Вороненко</i>	
Перенормировки сумм и интегралов в цифровом представлении .....	45
<i>М. Г. Иванов, А. Ю. Полушкин</i>	
Деформации решений супергравитации компактными изометриями .....	47
<i>Т. А. Петров, Э. Т. Мусаев</i>	
Симметрия «тяни-крюк» квантовых $b_j$ -символов .....	48
<i>Е. Н. Ланина, А. В. Слепцов</i>	
Фаза Гинзбурга–Ландау в кристаллических топологических сверхпроводниках .....	50
<i>Е. А. Тепляков, В. Г. Яржемский</i>	
Высокотемпературная электронно-дырочная жидкость в монослойных пленках дихалькогенидов переходных металлов .....	50
<i>П. Л. Пех</i>	
Петлевые поправки к току скалярных частиц в сильном электрическом пульсе .....	52
<i>П. С. Завгородний, Д. И. Садеков, К. А. Казарновский</i>	

Петлевые поправки к рождению частиц в нелинейной резонансной полости.....	52
<i>Д. А. Трунин</i>	
Дуальность Руйсенаарса между тригонометрической моделью Калоджеро и рациональной моделью Руйсенаарса как спектральная дуальность .....	53
<i>Е. С. Трунина</i>	
Исследование критической размерности вязкости при фазовом переходе бозе-флюида в сверхтекучее состояние .....	54
<i>Д. А. Давлетбаева, Л. Мижишин, М. Ю. Налимов</i>	
Космологическая инфляция в моделях модифицированной гравитации .....	55
<i>В. А. Шмидт, А. Б. Арбузов</i>	
Вычисление вкладов первых порядков по константе связи в вакуумную энергию скалярной КТП с дробным самодействием .....	57
<i>Н. А. Игнатюк, С. Л. Огарков, Д. В. Складный</i>	
Точные билинейные корреляторы в негауссовых матричных моделях .....	59
<i>К. Н. Цыбиков, В. В. Мишняков</i>	
Эволюция Шрамма–Лёвнера (SLE) и ее связь с CFT и критическими двумерными моделями .....	59
<i>М. Д. Зотов</i>	
Восстановление нелинейных потенциалов по флуктуационным операторам .....	60
<i>Н. М. Колганов, Ф. М. Хасанов</i>	
Теоретико-числовая перенормировка энергии вакуума.....	62
<i>В. А. Дудченко, М. Г. Иванов, В. В. Наумов</i>	
Деформация 11-мерной супергравитационной модели в формулировке $SL(5)$ исключительной теории поля .....	64
<i>С. А. Баракин, Э. Т. Мусаев, К. А. Губарев</i>	
Антиферромагнетик с анизотропией типа «легкая плоскость» в магнитном поле и электронный спиновый резонанс .....	64
<i>А. С. Щербаков, О. И. Утесов</i>	
Изучение абелевой проекции в решеточной КХД.....	66
<i>И. Е. Кудров, В. Г. Борняков</i>	
Ренормгрупповой анализ модели случайного роста .....	68
<i>М. А. Рейтерб8</i>	
Эволюция поляризации электрона в лазерно-плазменном ускорителе .....	69
<i>М. А. Васильев, В. А. Верейтин, А. В. Корибут, А. А. Севостьянова</i>	
Масса Дебая гравитона в пространстве де Ситтера .....	71
<i>Д. И. Садеков</i>	
Вычисление многопетлевых диаграмм в динамических моделях теории критического поведения .....	72
<i>А. В. Треногин, М. Ю. Налимов</i>	
Аналитичность и инвариантность корреляционных функций в пространствах Минковского и де Ситтера .....	72
<i>М. Н. Милованова</i>	
Число узлов волновой функции связанного состояния в рамках суперсимметричной квантовой механики .....	73
<i>А. Б. Айнбунд</i>	
<b>СЕКЦИЯ БИОФИЗИКИ .....</b>	<b>75</b>
Отслеживание конформационных изменений белков при помощи сольватохромных красителей на основе хромофорного ядра GFP .....	75
<i>А. С. Белоусов, И. А. Маслов, П. А. Хорн, А. С. Мишин, М. С. Баранов, Е. Ю. Зерний, С. Е. Пермяков, А. В. Мишин, В. И. Борщевский</i>	
Исследование транспорта субъединицы теломеразы TERT в митохондри .....	76
<i>Д. С. Буркатовский, И. В. Маслов, А. О. Богородский, В. И. Борщевский</i>	

Подготовка образца рецептора класса GPCR, ассоциированного с патогенезом рассеянного склероза, для структурных исследований .....	77
<i>Н. А. Сафронова, Т. С. Куркин, М. Б. Шевцов, В. И. Борщевский, И. С. Охрименко, Ю. А. Загрядская, А. В. Мишин</i>	
Структурное исследование неканонической трансаминазы из <i>Variovorax paradoxus</i> .....	78
<i>И. О. Матюта, А. Ю. Николаева, Е. Ю. Безсуднова, К. М. Бойко</i>	
Экспрессия, выделение и очистка рекомбинантного белка трансглутаминазы человека.....	79
<i>С. Д. Иващенко, Н. А. Бондарев, А. В. Власов</i>	
Исследование связывающего рецептора Эховируса 1 (штамм Farouk) с использованием нокаутной лентивирусной библиотеки GeCKO <sub>2</sub> .....	80
<i>О. Н. Алексеева, А. В. Липатова</i>	
Экспресс-методы оценки эффективности родопсинов как оптогенетических инструментов.....	81
<i>А. А. Громова, А. Д. Власова, С. М. Бухалович, А. Э. Михайлов, Н. А. Бондарев, А. В. Власов, А. И. Куклин</i>	
Молекулярная динамика фотодекарбоксилазы жирных кислот .....	82
<i>П. Е. Шишкин, А. С. Кузьмин, И. Ю. Гуцин</i>	
Исследование чувствительности белков-рецепторов QS систем мезофильных и психрофильных бактерий рода <i>Aliivibrio</i> к АГЛ.....	83
<i>Е. С. Щеглова, С. В. Баженов, И. В. Манухов</i>	
Экспрессия, очистка и функциональные тесты фотодекарбоксилазы жирных кислот из <i>Chlorella variabilis</i> .....	84
<i>О. Ю. Семенов, Е. А. Кузнецова, И. И. Натаров, А. Э. Михайлов, А. А. Ремеева, И. Ю. Гуцин</i>	
Специфичность антирестрикционного белка Osg .....	84
<i>А. А. Уткина, А. А. Кудрявцева, И. В. Манухов</i>	
Структура и динамика латеральной гетерогенности бислоев ДОФХ/ДОФС: результаты компьютерного моделирования .....	86
<i>И. И. Веретененко, Ю. А. Трофимов, Р. Г. Ефремов</i>	
Функциональные и спектральные свойства ксенородопсина с уникальной группой высвобождения протона .....	87
<i>Д. В. Дорогинин, А. А. Алексеев, Ф. М. Цыбров</i>	
Получение криоэлектронной структуры ретинального белка со связанным каротиноидом.....	88
<i>С. С. Баранова, А. И. Гуськов, Е. Г. Максимов, И. А. Ярошевич, А. В. Богачев, В. И. Борщевский</i>	
Влияние высокого давления благородных газов на закристаллизованный аденозиновый A <sub>2A</sub> -рецептор человека .....	88
<i>В. А. Поспелов, В. И. Борщевский, А. В. Мишин, Т. В. Котова, М. Б. Шевцов</i>	
Применение методов машинного обучения в виртуальном скрининге.....	89
<i>М. И. Ковалева, Е. В. Марьин, М. Н. Кадукова, Х. С. Мустафин, А. В. Рогачев, А. В. Мишин, В. И. Борщевский</i>	
Природное разнообразие бактериальных сенсоров калия KdpD .....	90
<i>М. В. Молчанова</i>	
Структурное исследование полноразмерного белка E SARS-CoV-2 и его доменов .....	92
<i>Е. А. Кузнецова, В. В. Назаренко, А. А. Ремеева, Ю. Л. Рижиков, И. Ю. Гуцин</i>	
Изучение возможностей расширения водных каналов липидных мезофаз в зависимости от способа их приготовления.....	93
<i>А. Ю. Шишкин, Е. А. Дронова, А. О. Богородский, А. Э. Михайлов, А. С. Казанцев, Д. Д. Куклина, Ю. С. Семенов, Е. В. Зиновьев, А. В. Власов, А. И. Куклин, Ю. Л. Рижиков</i>	
Спектральная настройка ксенородопсина VcXeR .....	94
<i>А. А. Привалов, А. А. Алексеев, Ф. М. Цыбров</i>	
dCache домен хеморецептора PctA: оценка функциональности по данным атомистического моделирования .....	95
<i>А. Р. Идиятуллина, А. С. Кузьмин, И. Ю. Гуцин</i>	

Моделирование различных олигомеров субъединицы с роторного кольца АТФ-синтазы из организма <i>Spinacia oleracea</i> .....	96
<i>А. С. Кузьмин, И. Ю. Гуцин</i>	
Микробный родопсин TRR1 является светочувствительной Na <sup>+</sup> /H <sup>+</sup> -помпой.....	97
<i>Г. А. Матвеев, Ф. М. Цыбров, К. В. Ковалев, А. А. Алексеев</i>	
Особенности функционирования протейродопсинов с DTS/DTG мотивом в зависимости от рН.....	98
<i>С. М. Бухалович, А. П. Полякова, Д. Ф. Багаева, Н. С. Ильинский, А. Д. Власова</i>	
Дизайн генетических конструкций для структурно-функциональных исследований GPCR, ассоциированного с патогенезом заболеваний репродуктивной системы .....	99
<i>А. Н. Хныкин, П. А. Хорн, А. П. Лугинина, Е. А. Смирнова, А. В. Мишин</i>	
Формирование О-состояния у протейродопсинов с DTG/DTS мотивом.....	100
<i>Д. В. Сидоров, С. М. Бухалович, Ф. М. Цыбров, А. Э. Михайлов</i>	
Исследование олигомерных состояний термокиназы DesK .....	100
<i>Д. Д. Куклина, М. И. Рулев, Т. Н. Муругова, Е. А. Дронова, Ю. С. Семенов, А. И. Куклин, Ю. Л. Рижиков</i>	
Исследование регуляции экспрессии гена ферритина А в клетках <i>Escherichia coli</i> .....	102
<i>А. Д. Гребенникова, С. В. Баженов, И. В. Манухов</i>	
Стационарная и времяразрешенная флуоресцентная спектроскопия в исследовании структурных свойств меланина.....	103
<i>П. С. Касьянова, Б. П. Якимов, А. В. Гайер, В. И. Щеславский, М. В. Ширманова, В. В. Елагин, Е. А. Ширшин</i>	
Методы оптической спектроскопии для определения состава и плотности конкрементов .....	104
<i>П. С. Церегородцева, Н. В. Злобина, З. А. Геворкян, Г. С. Будылин, Н. И. Сорокин, Е. А. Ширшин, А. А. Камалов</i>	
Использование фрагментов антител для структурных исследований GPCR.....	105
<i>А. А. Садова, Д. А. Дмитриева, М. Б. Шевцов, Н. А. Сафронова, Е. А. Смирнова, Т. С. Куркин, В. И. Борщевский, А. В. Мишин</i>	
Изучение возможности обмена субъединицами между молекулами апоферритина .....	106
<i>М. С. Гетте, В. В. Сударев, Ю. Л. Рижиков, С. В. Баженов, И. В. Манухов, М. Б. Шевцов, А. И. Куклин, А. В. Власов</i>	
Исследование факторов, влияющих на стехиометрию с-кольца АТФ-синтазы .....	107
<i>А. В. Минаева, С. Д. Осипов, В. В. Сударев, А. В. Власов, А. И. Куклин</i>	
Разработка и структурные исследования наночастиц вида ферритин–иммуноген .....	108
<i>В. В. Сударев, М. С. Гетте, С. В. Баженов, Ю. Л. Рижиков, Т. С. Куркин, Н. А. Бондарев, С. Д. Осипов, И. В. Манухов, А. И. Куклин, А. В. Власов</i>	
Структурно-функциональные исследования LOV-доменов архей.....	109
<i>И. И. Натаров, О. Ю. Семенов, А. А. Ремеева, И. Ю. Гуцин</i>	
The influence of Earth orbit microgravity and high magnetic field on protein atomic structure .....	110
<i>С. MacCarthy, E. Koudan, M. Shevtsov, Yu. Khesuani, V. Borshchevskiy</i>	
Уточнение природы атомов раствора в белковых кристаллах с использованием машинного обучения.....	110
<i>Х. С. Мустафин, И. Ю. Гуцин</i>	
Подготовка образцов рецепторов, сопряженных с G-белком, для исследования их структурной динамики методом одномолекулярной FRET-микроскопии .....	111
<i>И. А. Капранов, П. А. Хорн, И. В. Маслов, А. П. Лугинина, А. В. Мишин, В. И. Борщевский</i>	
Эволюционные методы оптимизации при расчетах оптических свойств органических пигментов .....	112
<i>В. А. Курков, Д. Д. Чесалин, Р. Ю. Пищальников</i>	
Исследования пространственной организации доменов архитектурных белков эукариот методами рентгеноструктурного анализа и электронной микроскопии .....	114
<i>А. Д. Буцева, А. В. Моисеенко, А. Ю. Николаева, А. Н. Бончук, К. М. Бойко</i>	
Применение флуоресцентных методов для изучения взаимодействия GPCR-лиганд.....	115
<i>Д. Е. Дашевский, А. П. Лугинина, П. А. Хорн, И. В. Маслов, В. И. Борщевский, А. В. Мишин</i>	

СЕКЦИЯ ПРОБЛЕМ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ, ЭЛЕКТРОФИЗИКИ, КВАНТОВОЙ РАДИОФИЗИКИ И ПРОБЛЕМ ФИЗИКИ И АСТРОФИЗИКИ .....	117
Оптическая накачка на центральный магнитный подуровень с использованием предварительного глубокого лазерного охлаждения тулия .....	117
<i>М. О. Яушев, Д. И. Проворченко, Д. А. Мишин, Д. О. Трезубов, А. А. Головизин</i>	
Сложная система наведения для открытого воздушного канала передачи высокостабильной оптической частоты .....	118
<i>А. Д. Легошин, К. А. Лискова, К. С. Кудеяров, Г. А. Вишнякова</i>	
Связь геометрии непланарной ячейки молекулярного агрегата с его поляризованным спектром поглощения .....	119
<i>С. С. Моритака, А. Д. Кондорский</i>	
Получение методом МПЭ короткопериодных сверхрешеток на основе InAs/GaSb .....	121
<i>В. С. Кривобок, Г. Н. Ерошенко, И. И. Минаев</i>	
Моделирование ошибки однокубитного рамановского гейта на нейтральных атомах рубидия из-за теплового движения в оптическом пинцете .....	121
<i>М. Ю. Голощапов, Д. А. Кузьменок, И. Б. Бобров, С. С. Страупе</i>	
Система регистрации заряженных частиц для исследования ультрахолодной плазмы и ридберговских атомов .....	123
<i>С. В. Климов, С. А. Саакян, К. П. Галстян, В. А. Саутенков, Б. Б. Зеленер</i>	
Потери атомов из большой полой дипольной оптической ловушки .....	124
<i>В. А. Виноградов, М. В. Платонова, А. В. Турлапов</i>	
Генерация третьей гармоники ( $\lambda/3$ ) излучения волоконного лазера на длине волны излучения $\lambda \sim 1$ мкм .....	126
<i>А. Р. Шайхтдинова, А. В. Коняшкин, П. Пую, О. А. Рябушкин</i>	
Поиск физики за пределами Стандартной модели с помощью $g$ -фактора связанного электрона .....	127
<i>Е. Д. Авдеенко</i>	
Исследование химического состава синтетических опаловых матриц методом лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии .....	128
<i>С. Ф. Уманская, М. А. Шевченко, А. В. Скрабатун, А. А. Матрохин, А. Н. Маресев, О. А. Гусева, Н. В. Чернега</i>	
Фотоотрыв электрона от дипольно-связанного молекулярного аниона .....	129
<i>А. В. Мекиун</i>	
Численный расчет сил электронных переходов в дипольном приближении в щелочных металлах при зеемановском расщеплении на примере лития-6 .....	131
<i>Т. Д. Рузайкин, К. А. Хоружий</i>	
Изучение достоверности масштабируемой двухкубитной фазовой операции на ионах $^{171}\text{Yb}^+$ с помощью численного моделирования .....	133
<i>П. А. Каменских, Н. В. Семенов, И. А. Семериков</i>	
СЕКЦИЯ СОВРЕМЕННЫХ ПРОБЛЕМ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ .....	135
Глубокое квантовое обучение в цепочках сверхпроводниковых кубитов-трансмонов .....	135
<i>А. Е. Толстобров, Г. П. Федоров, Ш. В. Сандуляну, Д. А. Калачева, А. Н. Болгар, В. Б. Лубсанов, Ш. В. Кадырметов, А. Е. Дорогов, А. Васенин, А. Ю. Дмитриев, О. В. Астафьев</i>	
Влияние сверхпроводимости на неоднородный магнетизм в грязных SF-контактах .....	136
<i>А. В. Левин, П. М. Островский</i>	
Влияние магнонов на сверхпроводящее состояние в гетероструктурах сверхпроводник–магнетик .....	137
<i>А. С. Яновская, А. М. Бобков, И. В. Бобкова</i>	
Моделирование СВЧ-генератора на основе джозефсоновского перехода .....	138
<i>Р. Тюменев, Д. С. Калашиников, В. С. Столяров</i>	
Квантовые вычисления на границе шестиугольной модели Китаева с беспорядком .....	139
<i>И. Л. Тимошук, К. С. Тихонов, Ю. Г. Махлин</i>	



СЕКЦИЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ .....	141
Математическое моделирование процессов теплопереноса при выращивании монокристаллов дифторидов со структурой флюорита в закрытых тиглях методом ГНК .....	141
<i>Ф. А. Юсим, С. Э. Саркисов, В. А. Юсим, П. А. Татауров, Л. В. Иванова, В. П. Михайлов</i>	
Модель диффузии на делокализованном поляроне для оценки вклада различных молекулярных фрагментов в подвижность .....	143
<i>В. В. Беляев, А. С. Соломатин, Д. Н. Чаусов, Р. Н. Кучеров, А. А. Беляев, Е. В. Царева</i>	
Компьютерное моделирование параметров ноль-эпсилон (ENZ) материалов прозрачных электродов для устройств оптических телекоммуникаций с новыми функциональными возможностями .....	145
<i>В. В. Беляев, А. С. Соломатин, А. Х. Абдуев, А. А. Беляев, Е. В. Царева</i>	
Моделирование разделения газов, вызванного тепловым скольжением на кромке пластины с разнонагретыми сторонами .....	147
<i>Я. М. Жихарев, Ф. Г. Черемисин, Ю. Ю. Клосс</i>	
Влияние наночастиц малослойных графитовых фрагментов на реологические свойства холестерического жидкого кристалла .....	148
<i>Р. Н. Кучеров, А. Д. Курилов, А. И. Смирнова, Н. В. Усольцева, Д. Н. Чаусов</i>	
Моделирование однородно распределенного газа с потенциалом взаимодействия Леннарда–Джонса и разработка параллельных алгоритмов решения уравнения Больцмана с помощью проекционного метода .....	149
<i>Т. С. Волжин, А. В. Нахапетян</i>	
Моделирование электромагнитных явлений с помощью параллельной гетерогенной программы ТРТ4 и исследование гетерогенного программирования .....	151
<i>А. А. Грачков</i>	
О функции распределения тяжелого компонента ударно-сжатой рэлеевской смеси газов .....	152
<i>М. М. Кузнецов, Ю. Д. Кулешова, В. И. Паренкина</i>	
Исследование влияния коэффициента диффузного отражения в коллиматоре на расходимость молекулярного пучка .....	154
<i>Е. Комаров, О. В. Воронова, А. С. Рябушенко</i>	
Влияние граничных условий на стенке трубки коллиматора на расходимость молекулярного пучка .....	155
<i>Е. Комаров, Ю. Ю. Клосс, Ф. Г. Черемисин</i>	
Моделирование и анализ процесса формирования ударных волн в микроканалах для неравновесных газокинетических процессов .....	156
<i>И. А. Кузенкова, И. В. Говорун, Е. Л. Остапов</i>	
Математическое моделирование и анализ работы многотрубчатого микронасоса Кнудсена при разделении газовых смесей .....	158
<i>И. В. Говорун, М. Б. Федерова, Л. А. Сазыкина</i>	
Зависимость ЭДС самоиндукции тонкой цилиндрической проволоки из металла от механизма поверхностного рассеяния электронов .....	160
<i>Э. В. Завитаев, К. Е. Харитонов</i>	
Разработка алгоритма численного решения кинетического уравнения Больцмана на основе проекционного метода и его ускорение .....	161
<i>Я. М. Жихарев, К. И. Баженов, Т. П. Бельцевич</i>	
Программный комплекс для численного решения задачи релаксации неравновесного газа в приближении потенциала твердых сфер .....	162
<i>А. В. Нигоян</i>	
Стратегические ориентиры ядерной энергетики в новой реальности .....	164
<i>В. Ф. Цибульский</i>	
Технико-экономический анализ применения жидкосолевых реакторных систем для замыкания ядерного топливного цикла по минорным актинидам, накопленным при переработке ОЯТ ВВЭР-1000 .....	165
<i>Л. А. Кормилицына, Т. А. Сазыкина, А. В. Сакмаров</i>	

Исследование разделения изотопов $^{20}\text{Ne}$ и $^{22}\text{Ne}$ при истечении естественного неона через тонкую щель в вакуум.....	166
<i>С. С. Ситников, Ф. Г. Черемисин</i>	
Количественные оценки образования газообразных продуктов радиолиза в упаковке высокоактивных радиоактивных отходов для моделирования процессов диффузии газов в конструкционные материалы для целей прогнозирования долговременных прочностных и коррозионных свойств упаковок .....	168
<i>А. А. Бабайлов, Л. А. Кормилицына, А. В. Наханетян, Д. В. Щербаков</i>	
Численное моделирование состояний тепловой системы в процессе синтеза монокристаллов фторидов в форме стержней и трубок методом ГНК .....	169
<i>В. А. Юсим, С. Э. Саркисов, Ю. Ю. Клосс, Ю. В. Широковская, Д. А. Бабайлов, С. М. Голуб</i>	
Влияние воздействия $\gamma$ -облучения на оптические спектры редкоземельных ионов в кристаллах фторидов .....	171
<i>С. Э. Саркисов, В. А. Юсим, В. В. Абанников, Р. К. Калимуллин, Д. О. Михайлов</i>	

## СЕКЦИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ОСНОВ МНОГОМАСШТАБНОГО АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ.....172

Расчеты методом молекулярной динамики с потенциалами комбинированного метода квантовой механики/молекулярной механики для изучения ферментативных реакций .....	172
<i>М. Г. Хренова</i>	
Молекулярная динамика дегидратированного двойного слоистого гидроксида алюминия и лития .....	172
<i>В. Г. Лукьянчук</i>	
Применение метода динамического сетевого анализа в исследовании механизма фоторегуляции фотоактивируемых аденилатциклаз.....	174
<i>М. С. Курьшикина, А. М. Кулакова, А. В. Немухин</i>	
Исследование бинарных смесей углеводов методом потенциала средней силы .....	175
<i>Б. И. Никитюк, В. В. Писарев</i>	
Природа перехода между аморфными льдами низкой и высокой плотности: молекулярно-динамическое моделирование процесса зарождения новой фазы .....	176
<i>А. А. Шуплецова, В. В. Стегайлов</i>	
Генерация сольватов CL-20 с помощью генератора случайных структур с фиксированным окружением .....	177
<i>Я. В. Пропад, И. А. Круглов</i>	
Сравнение энергий миграции точечных дефектов в нитриде урана, предсказываемых межатомными потенциалами ADP и EAM .....	178
<i>Е. А. Лобашев, А. С. Антропов, В. В. Стегайлов</i>	
Энергия и энтропия образования точечных дефектов на примере FeO .....	179
<i>Н. А. Фоминых, В. В. Стегайлов</i>	
Изучение коммуникации биомолекул с использованием теории информации .....	179
<i>Р. А. Маллаев, А. А. Полянский</i>	
Оптимизация параметров модели разрушения керамик путем моделирования распространения ударных волн в веществе в соответствии с экспериментом .....	181
<i>С. А. Дьячков, И. А. Щукин</i>	
Моделирование двойного электрического слоя на границе раствора карбоксицеллюлозы .....	181
<i>Г. К. Вандышев</i>	
Разработка пептидного блокатора калиевого канала EAG — прототипа нового противоопухолевого препарата .....	183
<i>Я. И. Заварзина, А. А. Василевский, А. О. Чугунов</i>	
Молекулярно-динамическое рассмотрение стационарных потоков жидкости .....	183
<i>Д. Г. Павлов, В. В. Стегайлов</i>	
Особенности формирования и экранирования локальных магнитных моментов вблизи перехода металл–изолятор .....	184
<i>Т. Б. Мазитов, А. А. Катанин</i>	

Критерии плавления в неоднородных ограниченных системах.....	186
<i>И. В. Аверин, А. В. Тимофеев</i>	
О связи упругих свойств и пористости керогенов по данным атомистического моделирования.....	187
<i>М. С. Алексеева, Н. Д. Кондратюк</i>	
Поиск составов конструкционных материалов с повышенной длительной прочностью с помощью методов машинного обучения .....	189
<i>А. Н. Клопов, А. В. Янилкин</i>	
Свойства циклических полиэфиров: метод молекулярной динамики .....	190
<i>И. К. Бакулин</i>	
Использование диаграммного расширения DMFT для приближенного вычисления динамических свойств системы коллективизированных электронов в фазе с волной спиновой плотности в режиме сильных корреляций.....	191
<i>И. А. Горемыкин, А. А. Катанин</i>	
Протонный перенос в воде .....	194
<i>В. Д. Негодин, А. В. Ланкин, Г. Э. Норман</i>	
Молекулярная динамика водных протонных катионов на интегралах по траекториям .....	196
<i>А. Е. Качесов, С. С. Жуков, К. А. Мотовилов</i>	
Численное исследование динамических и структурных свойств цепочек пылевых частиц в потоке плазмы газового разряда .....	198
<i>Д. А. Колотинский, А. В. Тимофеев</i>	
Эволюция молекулярного механизма ингибирования пенициллин-связывающих белков цефтриаксоном.....	199
<i>А. В. Кривицкая, М. Г. Хренова</i>	
Влияние структуры активного центра на эффективность активации субстратов в активных центрах металло- $\beta$ -лактамаз.....	200
<i>Л. Б. Каримуллина, А. В. Кривицкая, М. Г. Хренова</i>	
Моделирование диизопропилового эфира методом молекулярной динамики в различных межатомных потенциалах.....	202
<i>О. В. Кашурин</i>	
Транспортные свойства монокристалла диоксида циркония .....	204
<i>Н. А. Касапенко</i>	
Изучение поверхностного натяжения н-нонана в модели SAFT- $\gamma$ Mie.....	205
<i>О. М. Смирнов, Д. Ю. Ленева, В. В. Писарев</i>	
Применение методов машинного обучения для интегрирования уравнений движения в методе молекулярной динамики .....	206
<i>А. Л. Варламов, М. А. Орехов</i>	
Гетеродимерные состояния трансмембранных сегментов рецепторов DDR1 и ErbB2, предсказанные с помощью методов атомистического моделирования .....	207
<i>Е. А. Козлов, Р. Г. Ефремов</i>	
Конформационная свобода молекулы сахарозы в водном растворе.....	208
<i>В. И. Дещеня, Н. Д. Кондратюк</i>	
<b>СЕКЦИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ ФИЗИКИ КВАНТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ .....</b>	<b>210</b>
Экспериментальная реализация схемы раздачи квантового ключа на сверхдальние расстояния .....	210
<i>А. Э. Алиев</i>	
Оценка наблюдаемой с помощью квантовой памяти.....	211
<i>Л. А. Маркович</i>	
Удаленная аутентификация пользователей ВОЛС с помощью уникального волоконного паспорта.....	212
<i>А. С. Смирнов</i>	
Сцепленность как ресурс для когерентности ансамбля и информации о путях .....	214
<i>А. Д. Кодухов</i>	

Reducing laser phase noise for enhanced fidelity in Rydberg gates .....	215
<i>N. Kour, D. Svirsky, E. Lomov</i>	
Непрерывные квантовые блуждания по графу Клебша .....	215
<i>Т. Б. Фахрутдинов, Л. Е. Федичкин</i>	
Улучшение квантового решения оптимизационных задач с использованием классических алгоритмов ....	217
<i>Б. У. Нуриев</i>	
Разработка управления экспериментом по раздаче квантового ключа на высоких скоростях при помощи микроконтроллеров и ПЛИС .....	219
<i>Д. В. Стрижак</i>	
Исследование декогеренции в полупроводниковых двухточечных наноструктурах .....	219
<i>А. Е. Бердашкевич, Л. Е. Федичкин</i>	
Обеспечение криптографической стойкости протоколов квантового распределения ключа в условиях глобальных расстояний .....	221
<i>В. А. Пастушенко</i>	
Оценки точности информационных состояний квантовых битов .....	223
<i>Е. А. Паньковец, Л. Е. Федичкин</i>	
Физические неклонированные функции на основе рэлеевского рассеяния в оптоволоконных волноводах....	225
<i>М. В. Яровиков</i>	
Реализация квантовых операций с помощью кубитов, построенных на основе трех квантовых точек.....	226
<i>З. И. Саятин, Л. Е. Федичкин</i>	
Алгоритм эффективной обработки сигналов при передаче на дальние расстояния по квантовому каналу.....	228
<i>В. Д. Статъев</i>	
<b>СЕКЦИЯ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА .....</b>	<b>229</b>
Перестраиваемый терагерцевый фазовращатель на основе мембран GaAs.....	229
<i>А. С. Астраханцева, А. Шуваев, П. А. Гусихин, А. Пименов, И. В. Кукушкин, В. М. Муравьев</i>	
Микроструктура стали 17Cr–4Ni–4Cu после 3D-печати и моделирующей сварки.....	230
<i>Е. В. Васильев</i>	
Эффект Штарка в гетероструктурах с монослоями дихалькогенидов переходных металлов.....	232
<i>Г. М. Гольшиков, А. С. Бричкин, А. В. Черненко</i>	
Плазменные возбуждения в двумерной электронной системе в форме квадрата .....	233
<i>А. М. Зарезин, В. М. Муравьев, П. А. Гусихин, И. В. Кукушкин</i>	
Магнитооптические свойства и расчет констант затухания $(\text{YBiCa})_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ в широком диапазоне температур.....	235
<i>Н. Е. Купчинская, Ф. М. Максимов, А. И. Чернов</i>	
Поведение доменной структуры поверхности соединений $\text{TbFe}_{11-x}\text{Ti}$ в условиях механических напряжений .....	236
<i>Т. Р. Мишурина, Г. Г. Дунаева, А. И. Синкевич, Е. М. Семенова</i>	
Термическая стойкость механических свойств покрытий ZrN на быстрорежущей стали .....	237
<i>А. А. Плясункова, С. В. Злоцкий</i>	
Исследование механизмов электрической проводимости перфторсульфоновых мембран: исходной и модифицированной Tb (III)-формы.....	239
<i>Т. В. Резцов, Н. А. Лапатин</i>	
Усиление эффективного g-фактора в метаморфных гетероструктурах InGaAs/InAlAs .....	240
<i>Н. С. Сандаков, С. В. Гудина, В. Н. Неверов, А. С. Боголюбский, К. В. Туруткин, М. В. Якунин, И. С. Васильевский, А. Н. Виниченко</i>	
Константы магнитокристаллической анизотропии соединений $\text{Y}_2(\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x})_{17}$ .....	242
<i>А. И. Синкевич, М. Б. Ляхова, Е. М. Семенова, А. Ю. Карпенков</i>	
Прочность и пластичность двухслойной керамики на основе диоксида циркония .....	243
<i>Г. В. Григорьев, В. М. Васюков, Н. Ю. Ефремова, А. А. Дмитриевский</i>	

Исследование температурных характеристик экситонных состояний перовскита CsPbBr <sub>3</sub> :Er <sub>0.1</sub> .....	244
<i>С. Н. Терешко</i>	
Полимерные композиционные материалы на основе фотополимерных смол, модифицированных малослойным графеном, полученным в условиях СВЧ .....	246
<i>С. И. Титова, А. А. Возняковский</i>	
Низкоразмерный органический проводник <b>κ-BEDT-TTF<sub>2</sub>CuNCN<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub></b> — беспорядок в структуре и его влияние на проводящие свойства .....	248
<i>Э. И. Хасанова, А. В. Кузьмин</i>	
О самоактивации связей полимеров с неорганикой при деформировании их композиций .....	249
<i>И. С. Цебрук, Н. В. Классен, В. В. Кедров, А. П. Покидов</i>	
Магнитные свойства замещенных ферритов на основе Co, Ni и Zn .....	251
<i>Е. Д. Шипкова, Н. С. Перов, Д. П. Шерстюк, Д. А. Винник</i>	
Анализ структуры Джозефсоновского магнитного туннельного перехода: от классического до квантового приближения. ....	253
<i>В. В. Юрлов, К. А. Звездин, А. К. Звездин</i>	
Поведение циркониевой керамики, упрочненной оксидом алюминия, при различных скоростях деформации одноосным сжатием.....	254
<i>П. Н. Овчинников, В. М. Васюков, Н. Ю. Ефремова, А. А. Дмитриевский</i>	
<b>СЕКЦИЯ НАНООПТИКИ И СПЕКТРОСКОПИИ .....</b>	<b>256</b>
Эффект сверхтекучего увлечения между экситон-поляритонами и сверхпроводящим электронным газом.....	256
<i>А. Ф. Аминов, А. А. Соколик, Ю. Е. Лозовик</i>	
Год наблюдений за парниковыми газами спектрометром МЛГС .....	258
<i>И. Ш. Газизов</i>	
О взаимодействии Е-волн с тонкими слоями из слабо проводящего и прозрачного веществ .....	258
<i>Н. В. Зверев, А. Х. Абдуев, А. А. Зотов</i>	
Комплексные сечения спинового обмена при столкновении щелочных атомов в основном состоянии .....	260
<i>В. А. Картошкин</i>	
Синтез, структура, оптические и магнитные свойства кристаллов LnCr <sub>3</sub> (BO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> (Ln = Sm, Gd, Dy, Ho).....	262
<i>Н. Н. Кузьмин, К. Н. Болдырев, В. В. Мальцев, Е. П. Микляева</i>	
Нестационарная модель теплоемкости газовой атмосферы вблизи плазменного источника излучения .....	263
<i>Т. Линкова</i>	
Расчеты полевого и массового сдвигов для извлечения среднеквадратичных зарядовых радиусов изотопов таллия .....	264
<i>Г. О. Пенязьков, С. Д. Просняк, А. Е. Барзах, Л. В. Скрипников</i>	
Оптическая диагностика одиночных наночастиц, перспективных для применений в биомедицине .....	264
<i>Г. О. Силаев, Ф. В. Верещагин, А. Т. Шайдулин, Е. О. Орловская, Ю. В. Орловский, Ю. Г. Вайнер</i>	
Исследование проникновения оловянных микрокапель сквозь мембраны из одностенных углеродных нанотрубок .....	265
<i>Л. В. Степанов, В. В. Медведев, М. С. Кривокорытов</i>	
<b>СЕКЦИЯ КОСМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ И СОВРЕМЕННОЙ АСТРОФИЗИКИ .....</b>	<b>267</b>
О природе трехгорбых профилей пульсаров.....	267
<i>В. С. Бескин, А. Ю. Истомина, Ф. А. Князев, А. Г. Михайленко</i>	
Природа изменений геометрии джетов активных галактик .....	269
<i>И. М. Костричкин, А. В. Плавин</i>	
Слияние двойных кластеров первичных черных дыр .....	270
<i>Ю. Н. Ерошенко, В. Д. Стасенко</i>	
Моделирование поляризационной структуры релятивистских выбросов квазаров.....	271
<i>Р. В. Тодоров, Е. В. Кравченко, И. Н. Пащенко</i>	

Моделирование сегментированного детектора для регистрации гамма-излучения.....	273
<i>А. А. Мкртчян, А. С. Позаненко, П. Ю. Минаев</i>	
Нуклеосинтез в сценарии слияния нейтронных звезд разных масс. Влияние ядерных данных на динамику процесса .....	274
<i>А. Ю. Игнатовский</i>	
Однородное свечение неба, наблюдаемое сквозь горловину кротовой норы .....	274
<i>П. Самородская, М. Бугаев, И. Новиков, С. Репин</i>	
Исследование аномального динамического трения в потенциале однородного эллипсоида .....	276
<i>П. В. Костина, М. И. Зельников</i>	
Трансформации энергии и неидеальные электрические поля в сверхтонких токовых слоях по наблюдениям миссии MMS в хвосте Земной магнитосферы .....	277
<i>М. В. Леоненко</i>	
Исследование динамики магнитоакустических волн в неадиабатической плазме при наличии нагрева, зависящего от магнитного поля .....	278
<i>Д. В. Агапова, Д. И. Завершинский, С. А. Белов, Н. Е. Молевич</i>	
Искажение формы далеких объектов при случайном выборе пробных лучей .....	279
<i>А. Р. Гриненко, К. Н. Хмелевский, С. В. Репин</i>	
Модель двуслойной жидкости с неоднородными термодинамическими свойствами .....	281
<i>М. А. Юденкова, Д. А. Климачков, А. С. Петросян</i>	
Возможность регистрации позитронов и электронов галактических космических лучей в тераэлектронвольтовом диапазоне энергий с помощью их синхротронного излучения в магнитном поле Земли.....	282
<i>А. П. Стужин, В. В. Михайлов</i>	
Исследование эволюции характеристик магнитного поля и электрических токов в активной области Солнца .....	283
<i>В. С. Зубик, И. В. Зимовец</i>	
Определение расстояния по сверхновым .....	284
<i>А. И. Гимаев</i>	
Исследование спектра космического рентгеновского фона по данным боковой засветки архива наблюдений обсерватории NuSTAR.....	285
<i>А. А. Мухин</i>	
Исследование структуры искривленных джетов активных галактик на масштабах парсек .....	287
<i>В. А. Макеев, Ю. Ю. Ковалев, А. Б. Пушкарев</i>	
Моделирование неравновесной ионизации межзвездной среды на ударных волнах .....	288
<i>А. Н. Нежин, Е. М. Чуразов, И. И. Хабибуллин, Н. С. Лыскова</i>	
Оценка параметров модели нагрева излучающей плазмы в галактике M87.....	289
<i>В. А. Фролова, Е. Е. Нохрина</i>	
Оценка напряженности магнитного поля вблизи центральной черной дыры в квазаре 3C 273.....	291
<i>В. Р. Тихомирова, М. М. Лисаков</i>	
Силуэты кротовых нор, проходимых для излучения .....	292
<i>М. А. Бугаев, И. Д. Новиков, С. В. Репин, И. Д. Новиков мл.</i>	
Образование крупномасштабных структур в устойчиво стратифицированной затухающей турбулентности .....	295
<i>О. П. Воробьев, А. С. Петросян</i>	
Обнаружение субизображений квазара, сформированных плазменной линзой межзвездной среды Галактики .....	296
<i>Т. А. Корюкова, А. Б. Пушкарев</i>	
Волновые процессы в частично ионизированной астрофизической и космической плазме.....	297
<i>Ю. Т. Клименко, С. И. Сафонов, М. А. Федотова, А. С. Петросян</i>	
К вопросу об образовании пылевых облаков в ионосфере Марса .....	299
<i>Ю. С. Резниченко, А. Ю. Дубинский, С. И. Попель</i>	

Идентификация протонов и позитронов в эксперименте PAMELA методами машинного обучения.....	300
<i>А. В. Михайлова, Д. С. Смирнов, В. В. Михайлов (от имени коллаборации PAMELA), П. Е. Мухин</i>	
Линия смерти радиопульсаров — «Долина смерти».....	302
<i>В. С. Бескин, А. Ю. Истомин, П. Е. Литвинов</i>	
<b>СЕКЦИЯ ЛАЗЕРНЫХ СИСТЕМ И СТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ.....</b>	<b>304</b>
Quantum phenomena revealed by dipolar coupled H <sub>2</sub> O molecular network .....	304
<i>V. Uskov, M. Savinov, V. A. Abalmasov, E. S. Zhukova, V. G. Thomas, B. Gorshunov</i>	
Влияние ионов меди на транспортные и релаксационные свойства гидратированных эумеланинов .....	305
<i>П. А. Абрамов, С. С. Жуков, К. А. Мотовилов</i>	
Терагерцевая спектроскопия высокоэнтропийных соединений на основе гексаферрита.....	306
<i>А. А. Гурченко, Д. А. Винник, В. Е. Живулин, Н. А. Черкасова, А. Р. Зыкова, С. А. Гудкова, Б. П. Горшун, Л. Н. Алябьева</i>	
Стабилизация частоты полупроводникового лазера с помощью эффекта Зеемана .....	308
<i>Н. А. Капридов, А. В. Масалов, А. И. Львовский</i>	
Передача орбитального момента света спиновой системе в пленке феррит-граната.....	310
<i>С. Коларь, М. Кожаев, А. Федоров, В. Белотелов, А. Чернов</i>	
Динамика молекул H <sub>2</sub> O и D <sub>2</sub> O, локализованных внутри фуллеренов C <sub>60</sub> .....	311
<i>А. В. Мелентьев, М. Sajadi, Б. П. Горшун, С. С. Жуков</i>	
Радиочастотная, терагерцевая и рентгеновская спектроскопия монокристалла SrTiO <sub>3</sub> :Mn .....	313
<i>М. В. Таланов, А. И. Сташ, С. А. Иванов, Е. С. Жукова, Б. П. Горшун, Б. М. Некрасов, В. С. Столяров, В. И. Козлов, М. Савинов, А. А. Буш</i>	
Наносекундная лазерная обработка алюминитридной керамики для применения в микроэлектронике .....	314
<i>А. А. Свиридова, А. С. Щекин</i>	
<b>СЕКЦИЯ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ПЛОТНОСТЕЙ ЭНЕРГИИ .....</b>	<b>316</b>
Развитие импульсного разряда по тепловому механизму в проводящей воде под действием ультразвука.....	316
<i>А. А. Филаткин, В. А. Панов, В. Я. Печёркин</i>	
Трёхмерное моделирование электрического разряда постоянного тока в сверхзвуковом потоке воздуха ..	317
<i>Д. А. Тарасов, А. А. Фирсов</i>	
Проблема определения температуры разряда постоянного тока в сверхзвуковом потоке воздуха.....	319
<i>Р. С. Трошкин, А. А. Фирсов</i>	
Численное моделирование ограниченной однокомпонентной системы в условиях сильной неидеальности .....	321
<i>Е. С. Шпилько, Д. И. Жуховицкий</i>	
Железо: термодинамические, транспортные и оптические свойства из <i>ab initio</i> расчетов.....	323
<i>И. С. Гальцов, В. Б. Фокин, А. В. Дороватовский, Д. В. Минаков</i>	
Методика анализа перемежаемости в трехмерном пограничном слое по данным PIV-измерений.....	323
<i>А. А. Абдуллаев, А. Я. Котвицкий, И. А. Моралев</i>	
Расчет динамики активных частиц во внешних силовых полях .....	325
<i>А. Н. Беляев, А. Д. Киверин</i>	
Уравнение состояния меди с малым числом параметров .....	326
<i>К. А. Боярских, К. В. Хищенко</i>	
Исследование оптических свойств нитрида гафния при температурах до 4500 К .....	328
<i>А. С. Булава, А. М. Фролов</i>	
Измерение азимутальной скорости распространения возмущения потенциала плазмы в отражательном разряде с термокатодом .....	329
<i>М. А. Валинуров, А. В. Гавриков, Г. Д. Лизякин, А. П. Ойлер, Р. А. Усманов</i>	

Моделирование влияния локального импульсно-периодического нагрева на эффективность смешения поперечной струи со сверхзвуковым потоком.....	330
<i>Л. С. Волков, А. А. Фирсов</i>	
Волна горения в области смешения водорода с воздухом.....	332
<i>В. А. Воронов</i>	
Состояния материи за фронтом ударной волны в смеси тяжелого и легкого газов .....	333
<i>Г. В. Выскварко, С. А. Дьячков, П. Р. Левашов</i>	
Математическое моделирование эксперимента с быстрым электрическим нагревом образца .....	334
<i>А. Ч. Гаврильев, В. Н. Сенченко, С. А. Мельников</i>	
Трехмерная диагностика динамики янус-частиц в разряде низкого давления .....	336
<i>Д. А. Заморин, Р. А. Сыроватка</i>	
Исследование спектра излучения, инициируемого импульсным разрядом по поверхности феррита.....	338
<i>С. М. Климович, А. В. Бернацкий, С. Н. Андреев, А. П. Шевелько, С. Н. Цхай, С. Ю. Савинов</i>	
Диффузный вакуумный дуговой разряд во внешнем магнитном поле.....	339
<i>А. Д. Мельников, Р. А. Усманов, В. П. Полищук, Н. Н. Антонов, А. В. Гавриков</i>	
Термодинамические свойства двухатомных соединений с аргоном в низкотемпературной плазме .....	341
<i>М. А. Мальцев, И. В. Морозов, Е. Л. Осина, Ю. В. Миненков</i>	
Исследование особенностей инициации диффузной вакуумной дуги на катоде, моделирующем отработавшее ядерное топливо .....	342
<i>Д. Е. Миронов, Р. А. Усманов, А. Д. Мельников, В. П. Полищук</i>	
Зависимость показателя преломления монокристалла LiF в диапазоне давлений до 150 ГПа .....	343
<i>Е. И. Несмиянов, Я. Е. Стариков, Е. С. Шестаковская, А. Я. Лейви</i>	
Масс-спектр плазменного сепаратора с аксиально симметричным распределением потенциала .....	345
<i>А. П. Ойлер, Г. Д. Лизякин, А. В. Гавриков</i>	
Первопринципное исследование тугоплавких металлов в околокритическом состоянии .....	347
<i>М. А. Парамонов, Д. В. Минаков, П. Р. Левашов</i>	
Факторы, влияющие на длину продольно-поперечного разряда в сверхзвуковом потоке воздуха.....	349
<i>Е. Е. Перевоицков, А. А. Фирсов</i>	
Экспериментальное исследование кинетического разогрева микрочастиц, вызванного нарушением симметрии взаимодействия в газоразрядной плазме.....	350
<i>Э. А. Саметов, Е. А. Лусин, Е. А. Кононов, О. С. Ваулина, М. М. Васильев, О. Ф. Петров</i>	
Активное броуновское движение частиц в квазиодномерных (цепочечных) структурах при воздействии лазерного излучения.....	352
<i>А. С. Светлов, Е. А. Кононов, О. Ф. Петров, М. М. Васильев</i>	
Применение модифицированного метода TCSPC для изучения развития поверхностного барьерного разряда .....	353
<i>И. В. Селивонин, С. Е. Кувардин</i>	
Влияние предельного тока разряда на параметры формирующегося искрового канала .....	355
<i>Х. Т. Смазнова, Е. В. Паркевич, А. И. Хирьянова, С. М. Климович, Д. В. Толбухин</i>	
Коллективные эффекты в активной коллоидной системе сложного состава при воздействии лазерного излучения.....	355
<i>Р. В. Сеношенко, Е. А. Кононов, М. М. Васильев, О. Ф. Петров</i>	
Моделирование ударно-волновых процессов в сплаве Mg–Li при высоких давлениях и температурах.....	356
<i>Н. Н. Середкин, К. В. Хищенко</i>	
Моделирование дифракции лазерного излучения в приграничном слое «металлический электрод—плазма воздушной среды» .....	357
<i>Д. В. Толбухин, А. И. Хирьянова, Е. В. Паркевич, Х. Т. Смазнова</i>	



СЕКЦИЯ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ .....	359
Организация канала связи между оператором и дозиметрическим комплексом, установленном на беспилотном летательном аппарате, при проведении задач радиационного мониторинга .....	359
<i>И. А. Родионов, А. П. Елохин</i>	
Биодеструкция минеральных матриц в условиях хранилищ радиоактивных отходов .....	360
<i>Е. С. Абрамова, А. В. Сафонов, Н. М. Попова</i>	
Анализ экспериментальных данных для валидации расчетной модели скруббирования продуктов деления при барботаже парогазовой смеси в воде .....	361
<i>Н. Д. Гембицкий, К. С. Долганов</i>	
Анализ аварии с доступом воздуха в вакуумную камеру ИТЭР с использованием программы для ЭВМ СОКРАТ-V1/V2.....	362
<i>И. С. Ахмедов, Н. И. Рыжов</i>	
Анализ влияния учета подъема факела из вентиляционной трубы на прогнозируемые дозы населения от штатных выбросов АЭС .....	363
<i>П. А. Коняев, А. А. Киселев</i>	
Геохимическое моделирование иммобилизации урана в подземных водоносных горизонтах с учетом биогеохимического фактора .....	365
<i>Н. М. Попова, А. В. Сафонов, К. А. Болдырев</i>	
Сравнительный анализ оценок осаждения техногенных аэрозолей от аварийных выбросов радиоактивных веществ за счет подоблачного вымывания в случае интегральных и дисперсных моделей .....	366
<i>А. С. Осадчий, А. А. Киселев</i>	
Повышение точности характеристики контейнеров РАО больших объемов с помощью систем получения гамма-изображений .....	368
<i>О. П. Иванов, В. Н. Потапов, И. А. Степалин</i>	
Распределение температуры внутри жидких включений во внешнем поле температурного градиента.....	369
<i>О. О. Корчагина</i>	
Математическое моделирование влияния морской бризовой циркуляции на перенос и рассеяние радионуклидов в атмосфере .....	371
<i>Д. Ю. Гуляев</i>	
СЕКЦИЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ И НАНОФОТОНИКИ .....	373
Влияние формы и размеров частиц магнитных наполнителей на диэлектрическую проницаемость композитных материалов .....	373
<i>А. В. Долматов, С. С. Маклаков, Д. А. Петров</i>	
Максимизация удельного потока между связанными квантовыми системами как прекурсор перехода в режим сильной связи .....	374
<i>И. В. Вовченко, А. А. Зябловский, А. А. Пухов, Е. С. Андрианов</i>	
Особые точки в волоконных лазерах с двухдефектным резонатором .....	375
<i>Д. К. Высоких, А. В. Дорофеев, О. В. Бутов</i>	
Майорановские состояния в допированных топологических изоляторах с нематической сверхпроводимостью .....	375
<i>А. В. Капранов, Р. Ш. Акзянов, А. Л. Рахманов</i>	
Переключаемый воздействием температуры СВЧ экран на основе композита с включениями частиц Gd.....	376
<i>И. В. Комаров, С. Н. Старостенко, Д. А. Петров</i>	
Реконфигурируемое усиление экваториального магнитооптического эффекта Керра в Ми-резонансных кремний-никелевых нанорешетках .....	377
<i>К. А. Мамян, А. Ю. Фролов, И. В. Божьев, В. В. Попов, А. А. Федянин</i>	
Важность корреляций для особых точек и сильной связи .....	379
<i>И. С. Пашкевич, И. В. Доронин</i>	

Анализ ГКР спектров ангиотензин-превращающего фермента человека с помощью методов статистики и инейного дискриминантного анализа .....	380
<i>Р. Р. Сафиуллин, И. А. Богинская, Н. Л. Нечаева, В. Е. Тихомирова, О. В. Крюкова, О. А. Кост, К. Н. Афанасьев, И. А. Рыжиков, Н. И. Булаева, Е. З. Голухова</i>	
Условный (heralded) однофотонный источник на основе спонтанного рамановского рассеяния .....	381
<i>И. В. Панюков, В. Ю. Шишиков, Е. С. Андрианов</i>	
<b>СЕКЦИЯ «ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И КОСМОЛОГИЯ» .....</b>	<b>382</b>
Электромагнитный калориметр эксперимента ALICE3 на Большом адронном коллайдере .....	382
<i>Е. В. Амбарцумян, Ю. В. Харлов</i>	
Этапы моделирования прототипа Баксанского большого нейтринного телескопа.....	384
<i>А. А. Будзинская</i>	
Расчет электромагнитных характеристик полосковых датчиков положения пучка для линейных резонансных ускорителей ионов .....	384
<i>В. Е. Амосова, С. А. Гаврилов</i>	
Поиск Новой физики в прямом CP-нарушении в интерференции древесных $b \rightarrow c\bar{s}$ и пингвинных $b \rightarrow s\bar{s}$ амплитуд .....	386
<i>Д. С. Гаврилов, А. Е. Бондарь, П. Н. Пахлов</i>	
Детектирование $\Sigma^0$ -гиперона в протон-протонных столкновениях с энергией 13 ТэВ на эксперименте ALICE на LHC.....	388
<i>Н. О. Гладин, С. А. Солохин</i>	
Поиск распадов нейтральных пионов на три и четыре фотона в эксперименте NA62 (ЦЕРН).....	388
<i>К. Ю. Горшанов</i>	
Статус поиска темных фотонов в ближнем детекторе эксперимента T2K.....	389
<i>А. С. Горин</i>	
Уточнение калибровки DANSS с помощью остановившихся космических мюонов .....	391
<i>П. А. Горовцов</i>	
Влияние на обратную связь гидрометеоров в простейшем грозовом реакторе.....	392
<i>Д. И. Землянская</i>	
Текущий статус 3D-сегментированного детектора нейтрино SuperFGD для эксперимента T2K.....	393
<i>А. Е. Дергачева, Г. С. Ерофеев, Н. В. Ершов, Д. В. Федорова, С. А. Федотов, Ю. Г. Куденко, А. В. Мефодьев, О. В. Минеев, М. М. Хабибуллин, А. Н. Хотянцева, А. А. Чвириова, Д. О. Чернов</i>	
Два метода модельного анализа корреляций поперечного импульса и множественности в диапазоне энергий NICA и SPS.....	394
<i>А. П. Звягина, Е. В. Андронов</i>	
Исследование временного разрешения прототипа времяпролетного нейтронного детектора в эксперименте VM@N на пучке Хе с энергией 3,8 АГэВ.....	395
<i>А. А. Зубанков</i>	
Изучение возможных фоновых процессов для поиска тяжелого нейтрино в распаде $D_s^+ \rightarrow \mu^+ N \rightarrow \mu^+ \mu^+ \pi^-$ .....	397
<i>Я. А. Андреев, А. С. Седельников, К. М. Иванов, Р. Н. Чистов</i>	
Новые спектры антинейтрино $^{235}\text{U}$ , $^{238}\text{U}$ , $^{239}\text{Pu}$ и $^{241}\text{Pu}$ , полученные из эксперимента Double Chooz .....	398
<i>А. П. Власенко, С. В. Ингерман, П. Ю. Наумов, В. В. Синев</i>	
Магнитооптическая структура отводных каналов BuPass в синхротроне NICA для поиска ЭДМ в режиме накопительного кольца.....	399
<i>С. Колокольчиков, Ю. Сеничев</i>	
Рассмотрение адаптированной структуры Nuclotron для поиска EDM.....	399
<i>С. Колокольчиков, Ю. Сеничев</i>	
Детектор частиц на основе сцинтиллирующих сред с сильным рассеянием .....	400
<i>А. Л. Крапива, Д. Н. Свирида</i>	

Использование нейронных сетей для реконструкции углов прилета частиц в нейтринном телескопе Baikal GVD .....	402
<i>А. Ю. Леонов</i>	
Пионный канал распада темного скаляра.....	403
<i>Е. А. Крюкова</i>	
Исследование влияния магнитного поля на фотоэлектронные умножители, применяемые в проекте Большого баканского нейтринного телескопа .....	404
<i>А. Д. Луканов</i>	
Разработка времяпролетного детектора быстрых нейтронов для эксперимента BM@N .....	406
<i>А. И. Махнев</i>	
Применение методов машинного обучения для разделения событий, вызванных мюонами и нейтрино, в эксперименте BAIKAL-GVD .....	407
<i>А. В. Мацейко</i>	
Реконструкция треков протонов с использованием пиксельных детекторов для протонной компьютерной томографии.....	410
<i>В. В. Петров, В. И. Жеребчевский, В. П. Кондратьев, Н. А. Мальцев, Н. А. Прокофьев, Е. О. Землин, И. И. Ерыгин</i>	
Обнаружение новых состояний в спектре инвариантной массы $J/\psi J/\psi$ в протон-протонных столкновениях в эксперименте CMS .....	411
<i>Н. К. Петров</i>	
Диагностика пучков по свечению остаточного газа на ускорителе ИЯИ РАН.....	412
<i>И. И. Полоник, С. А. Гаврилов</i>	
Двойное комптоновское рассеяние в сильно замагниченной плазме .....	414
<i>Т. А. Пухов</i>	
Моделирование образования спектаторных фрагментов в $^{208}\text{Pb}-^{208}\text{Pb}$ -столкновениях в эксперименте MPD на коллайдере NICA.....	415
<i>С. Д. Савенков, Р. С. Непейвода, А. О. Светличный, И. А. Пшеничнов</i>	
Изучение нарушения CP-симметрии в распадах $D^0$ -мезонов в эксперименте CMS.....	417
<i>В. С. Сергейчик, С. М. Поликарпов</i>	
Измерение темпов счета межэтажных совпадений на Байкальском нейтринном телескопе Baikal-GVD....	418
<i>Б. Б. Ульзутуев</i>	
Результаты и планы эксперимента NA64e в ЦЕРН .....	420
<i>И. В. Тлсова</i>	
Оценка эффективности определения заряда частиц в ближнем детекторе ND280 нейтринного эксперимента T2K.....	422
<i>Д. В. Федорова</i>	
Исследование корреляций низкоэнергетического фона нейтринного эксперимента LVD с различными геоэффектами .....	423
<i>Н. А. Филимонова, Н. Ю. Агафонова</i>	
Генерация показаний наземного детектора эксперимента Telescope agau и поиск аномалий с помощью нейронных сетей .....	424
<i>Р. Р. Фитагдинов</i>	
Статус поиска дефицита электронных нейтрино в ближнем детекторе ND280 эксперимента T2K.....	426
<i>А. С. Шварцман</i>	
Эксперимент NA64mu в ЦЕРН.....	426
<i>Д. А. Шукин</i>	
Измерение абсолютных вероятностей распадов $B_s \rightarrow D_{(s)}$ в эксперименте Belle .....	428
<i>М. И. Ясавеев</i>	
Моделирование процессов образования чармония $\chi_c$ в эксперименте ALICE 3 .....	429
<i>А. М. Варламов, Ю. В. Харлов</i>	

Исследование свойств 3D-сегментированного детектора нейтрино СуперFGD .....	430
<i>М. А. Колупанова, Ю. Г. Куденко, А. В. Мефодьев</i>	
Фазовый переход в позитронии при движении в магнитном поле .....	431
<i>А. А. Симовоня</i>	
Измерение и мониторинг светимости на установке ALICE Большого адронного коллайдера (ЦЕРН).....	432
<i>А. А. Фурс, Н. О. Вознюк, Т. Л. Каравичева, Д. В. Серебряков, М. А. Суханов</i>	
<b>СЕКЦИЯ «ИТЭР — ШАГ В ЭНЕРГЕТИКУ БУДУЩЕГО» .....</b>	<b>433</b>
Измерение рассеянных вертикальных полей в токамаке MERIST-0 с помощью электронного пучка .....	433
<i>Е. А. Виницкий, Н. Е. Ефимов, А. С. Пришивицын, С. А. Крат, И. А. Сорокин</i>	
Численная модель воздействия интенсивного плазменного потока на макеты защитных покрытий токамака ИТЭР.....	434
<i>И. А. Алябьев, В. Ю. Цыбенко, Е. З. Бирюлин, И. М. Позняк, З. И. Новоселова, Е. Д. Федулаев, А. Б. Путрик</i>	
Исследование параметров периферийной плазмы Z-пинча с помощью квазиплоскопольного спектрографа .....	435
<i>Г. А. Старцев, А. Н. Грицук</i>	
Восстановление пространственного распределения интенсивности нейтронного излучения плазмы в токамаке ИТЭР методами машинного обучения .....	436
<i>А. С. Жаров, Р. Н. Родионов</i>	
Моделирование спектра нейтронного излучения в каналах коллиматоров ВНК ИТЭР на основе функции распределения быстрых ионов плазмы.....	437
<i>П. А. Ревякин, Р. Н. Родионов</i>	
Измерение характеристик двухканального спектрометра-полихроматора высокого разрешения для активной спектроскопии плазмы токамака EAST .....	438
<i>И. А. Макаренко, Н. В. Кузьмин, С. Н. Тугаринов</i>	
Анализ функции отклика детектора быстрых нейтронов на основе кристалла хлорида лантана.....	439
<i>А. В. Панкратенко, А. С. Джурик, С. Ю. Обудовский, Т. М. Кормилицын, Ю. А. Кащук</i>	
Общий аналитический подход к вычислению тороидальных токов индукции в резистивной стенке токамака.....	440
<i>Н. В. Чукашев, В. Д. Пустовитов</i>	
Расчет полей температур энергонапряженных компонентов панели первой стенки модуля № 7 тип А бланкета ИТЭР .....	441
<i>С. А. Козлов, С. Н. Томилов, И. И. Поддубный, М. Н. Свириденко, А. Б. Путрик</i>	
Развитие диагностического комплекса для измерения нейтронного излучения термоядерной D-D плазмы на установке МК-200 .....	443
<i>Д. А. Бурмистров, В. В. Гаврилов, А. А. Жарова, С. Д. Лиджигорьяев, Д. А. Топорков</i>	
Защита вольфрама от воздействия мощных потоков водородной плазмы слоем легкоплавкого материала с высоким зарядовым числом.....	445
<i>С. Д. Лиджигорьяев, В. А. Барсук, Д. А. Бурмистров, В. В. Гаврилов, И. М. Позняк, А. В. Пушина, Д. А. Топорков</i>	
Измерение азимутального распределения магнитного поля Z-пинча в многопроволочных сборках на установке «Ангара-5-1» при помощи магнитных зондов .....	446
<i>К. С. Бездетный</i>	
Оценка температурного поля в сборке гибкой опоры внутреннего бланкета реактора ИТЭР при разрушении электроизоляционного покрытия.....	447
<i>Б. И. Никулин, И. И. Поддубный, М. Н. Свириденко, И. В. Данилов, А. Б. Путрик</i>	
Разработка и применение быстрого трехканального инфракрасного пирометра для измерения температуры поверхности вольфрамовой мишени в процессе взаимодействия с мощными потоками водородной плазмы .....	449
<i>А. В. Пушина, Д. А. Бурмистров, С. В. Карелов, С. Д. Лиджигорьяев, И. М. Позняк, Д. А. Топорков</i>	
Исследование процесса инжекции рабочего газа в межэлектродный зазор плазменного ускорителя МК-200 X8.....	451
<i>Е. З. Бирюлин, В. Ю. Цыбенко, И. А. Алябьев, И. М. Позняк, З. И. Новоселова, Е. Д. Федулаев</i>	

Автоматизированный метод выделения активного сигнала CXRS-диагностики.....	454
<i>А. А. Храпов, В. А. Крутин, М. Р. Нургалиев</i>	
Применение спектрометров для измерений потоков нейтронов в смешанных DD и DT полях .....	455
<i>Д. С. Фридрихсен, Т. М. Кормилицын, С. Ю. Обудовский, Ю. А. Кацук</i>	
Измерение временного профиля мощности мультитераваттного излучения Z-пинча волоконно-вольфрамовых сборок на установке «Ангара-5-1».....	457
<i>Е. П. Ахмеров, А. Н. Грицук</i>	
<b>СЕКЦИЯ ФОТОНИКИ И ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ .....</b>	<b>458</b>
Исследование оптических свойств слоистого соединения $\text{EuS}_2$ , синтезированного при высоком давлении, с помощью комбинационного рассеяния света с разрешением по поляризации.....	458
<i>Е. А. Екимов, С. Н. Николаев, И. И. Усманов</i>	
Определение оптических констант ван-дер-ваальсовых материалов методами поляризационной микроспектроскопии .....	460
<i>А. С. Славич, Г. А. Ермолаев, М. С. Миронов, А. Н. Токсумаков</i>	
Оптомеханические модуляторы терагерцевого излучения на основе пленок одностенных углеродных нанотрубок .....	460
<i>В. В. Старченко, М. И. Пауков, Д. В. Красников, Ю. Г. Гладуш, С. С. Жуков, Б. П. Горшунов, Г. А. Командин, А. Г. Насибулин, А. В. Арсенин, В. С. Волков, М. Г. Бурданова</i>	
Топологический эффект Фарадея для оптических вихрей в магнитной пленке.....	461
<i>А. Ю. Федоров, М. А. Яворский, М. А. Кожяев, Д. В. Викулин, Е. В. Баршак, В. Н. Бержанский, П. О. Капралов, В. И. Белотелов</i>	
Эффект Гуса–Хенхен в сингулярной точке отражения.....	463
<i>М. Е. Хавронин, А. А. Вишневы</i>	
Определение плазменной частоты платины.....	464
<i>А. П. Целин</i>	
Высокодобротные резонансы в сферических наночастицах с радиальной анизотропией .....	464
<i>А. Эгбали, А. А. Вишневы</i>	
Синтез литий-проводящей керамики со структурой NASICON методом быстрого спекания.....	466
<i>И. И. Яковлев, Д. С. Зимбовский, С. Сюй, А. В. Кирьянова, П. В. Евдокимов, О. О. Капитанова</i>	
Гальваномагнитные моды в двумерных электронных системах.....	467
<i>А. С. Петров</i>	
Ударная волна как решение ОТО, моделируемое в материале .....	468
<i>Д. Г. Баранов, А. А. Белов</i>	
Поиск оптимальных режимов генерации сигнала вырожденного четырехволнового смешения в интегральных микрорезонаторах при двойной накачке.....	469
<i>А. К. Воробьев, Н. А. Капридов, Г. В. Гречко, Т. Р. Юнусов, Д. А. Чермошенцев, А. Е. Шитиков, В. Е. Лобанов, А. В. Масалов, И. А. Биленко</i>	
Электромагнитные моды в скрученных трехслойных гетероструктурах на основе двуосных кристаллов .....	471
<i>К. В. Воронин, В. С. Волков, А. Ю. Никитин</i>	
Измерение характеристик интегральных оптических микрорезонаторов.....	472
<i>А. П. Горшков, А. К. Воробьев, Д. А. Чермошенцев, А. В. Масалов, И. А. Биленко</i>	
Уменьшение перекрестных помех между интегральными анизотропными оптическими волноводами .....	474
<i>Д. В. Грудинин</i>	
Ионно-лучевой метод создания монокристаллических наночастиц серебра для повышения стабильности плазмонных свойств наноструктур .....	475
<i>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</i>	
Гигантская оптическая анизотропия ван-дер-ваальсовых материалов и их приложения в фотонике следующего поколения .....	476
<i>Г. А. Ермолаев</i>	

Экситон-поляритонное резонансное оптическое отражение системой из 30 квантовых ям GaN/AlGaN при комнатной температуре .....	477
<i>А. А. Иванов, В. В. Чалдышев</i>	
Функционально-полный набор оптомагнетронных логических элементов .....	479
<i>А. А. Колосветов, А. И. Чернов</i>	
Широкополосные оптические свойства наночастиц на основе карбида титана (MXene) .....	480
<i>И. С. Казанцев, Д. А. Панова, Г. А. Ермолаев, Г. И. Целиков</i>	
Изучение эффекта Казимира в системе с золотыми пластинками, помещенными в раствор СТАВ-а.....	481
<i>Д. Г. Баранов, М. И. Краснов</i>	
Фотолюминесценция двумерных наночастиц MoS <sub>2</sub> , полученных методом жидкостной эксфолиации.....	482
<i>М. Ю. Лукьянов, С. А. Евлашин</i>	
Электронные, оптические и морфологические свойства квазидвумерных пленок золота .....	483
<i>М. С. Миронов, Д. И. Якубовский, И. С. Казанцев</i>	
Широкополосные оптические свойства карбида титана.....	485
<i>Д. А. Панова, Г. А. Ермолаев, Г. И. Целиков</i>	
Исследование ультрабыстрых процессов в нанотрубках из дисульфида вольфрама.....	486
<i>М. И. Пауков, А. Е. Гольдт, П. Мишира, Д. И. Якубовский, А. В. Сюй, А. А. Мельников, Г. А. Командин, А. Г. Насибуллин, А. В. Арсенин, В. С. Волков, М. Г. Бурданова</i>	
Межкраевой плазмон Берри: невзаимная настраиваемая плазменная мода в отсутствие магнитного поля .....	487
<i>А. С. Петров</i>	
Изучение одиночных дефектов в гексагональном нитриде бора .....	488
<i>Е. А. Примак, П. Г. Вилюжанина, С. В. Большедворский, В. В. Сошенко, А. В. Акимов</i>	
Плазмон-поляритоны в метакристаллах из сферидальных нанорезонаторов.....	490
<i>Е. Ю. Рябков, И. С. Харичкин, Д. Г. Баранов</i>	
Точки топологической фазовой сингулярности в дисульфиде молибдена .....	491
<i>М. Н. Сидорова</i>	

## СЕКЦИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ, НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР И КВАНТОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ....492

Изучение сверхпроводящих свойств Na(Fe,Co)As .....	492
<i>И. В. Жувагин</i>	
Универсальность и выделенные состояния спектров многотерминальных SNS-контактов.....	493
<i>А. Ф. Посадский, А. Г. Семенов</i>	
Методика Pump-probe с лазерной накачкой и электрическим зондированием.....	494
<i>М. И. Блуменау, Е. В. Таркаева, А. Ю. Кунцевич</i>	
Наблюдение бозонной моды методом SnS-андреевской спектроскопии в соединении (K,Na)Fe <sub>2</sub> Se <sub>2</sub> .....	494
<i>В. М. Михайлов, С. А. Кузьмичев, А. Д. Ильина, И. А. Никитченков, И. В. Морозов, А. И. Болталин, А. И. Шилов, Т. Е. Кузьмичева</i>	
Туннельная спектроскопия пниктидов Ba(Fe,Ni) <sub>2</sub> As <sub>2</sub> с вариацией степени допирования в нормальном состоянии.....	496
<i>И. А. Никитченков, С. А. Кузьмичев, К. С. Перваков, В. А. Власенко, А. Д. Ильина, В. М. Михайлов, Т. Е. Кузьмичева</i>	
Электронные свойства кристалла Bi <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> , интеркалированного атомами Cu .....	497
<i>М. А. Наумов, А. Ю. Кунцевич, Ю. Г. Селиванов</i>	
Зависимость контактных углов графенового покрытия от профиля материала под ним .....	499
<i>И. А. Бетке</i>	
Спектроскопия многократных андреевских отражений сверхпроводящего селенида (K,Na)Fe <sub>2</sub> Se <sub>2</sub> .....	500
<i>А. Д. Ильина, С. А. Кузьмичев, В. М. Михайлов, И. А. Никитченков, И. В. Морозов, А. И. Шилов, Т. Е. Кузьмичева</i>	

СЕКЦИЯ АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ ГЕОМЕТРИИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ.....	502
Неупругие эффекты теории поля Изинга в чисто мнимом магнитном поле.....	502
<i>Д. Д. Менской</i>	
Гипотеза Джонса на косах ширины 4 .....	503
<i>Д. В. Корзун, А. В. Слепцов</i>	
К-стабильность трехмерных логарифмических многообразий Фано с неприводимой границей .....	504
<i>К. В. Квитко</i>	
Спектр собственных значений большой действительной антисимметричной случайной матрицы .....	505
<i>А. Коцевич, П. А. Мещеряков</i>	
Подход усеченного конформного пространства (TCSA) к неунитарным минимальным моделям .....	507
<i>А. Коцевич, А. В. Литвинов</i>	
Об уравнениях Бете конформной теории поля в квазиклассическом пределе .....	508
<i>П. Е. Орлов, А. В. Литвинов</i>	
Двухпетлевая структура модели главного кирального поля .....	509
<i>П. В. Акацевич, А. В. Иванов</i>	
Множественные зеркала и JKLMR-гипотеза .....	510
<i>Б. А. Еремин, А. А. Белавин</i>	
СЕКЦИЯ ФИЗИКИ КВАНТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ.....	512
Влияние декогерентности на состояние кудита.....	512
<i>Д. А. Тарпанов, Л. Е. Федичкин</i>	
Destruction of quantum coherence in non-integrable billiards .....	514
<i>L. D. Silakov, Ya. S. Lyakhova, A. N. Rubtsov</i>	
Влияние разной эффективности детекторов на финальный ключ в случае квантового канала спутник–Земля .....	515
<i>Е. И. Ивченко, А. В. Хмелев, В. Л. Курочкин</i>	
Quasiprobability model with minimal circuit negativity based on overcomplete frames.....	517
<i>D. A. Kulikov, V. I. Yashin, E. O. Kiktenko, A. K. Fedorov</i>	
Attracting identical fermions in strongly disordered media.....	518
<i>L. I. Kniazeva, V. I. Yudson</i>	
Тензорные сети для восстановления непрерывных волновых функций .....	520
<i>И. И. Рызов, Е. С. Тиунов, А. К. Федоров</i>	
Подбор параметров SQUID для реализации перестраиваемых резонаторов .....	521
<i>И. Е. Тарасова, И. А. Нажесткин, Д. С. Яковлев</i>	
Исследование динамической модели затягивания диодного лазера на микрорезонатор с модами «шепчущей галереи» .....	523
<i>Д. М. Сокол, А. Е. Сахарова, А. Е. Шитиков, Д. А. Чермошенцев, И. А. Биленко</i>	
Исследование нелинейной динамики затягивания двух диодных лазеров на моды интегрального кольцевого резонатора .....	525
<i>А. Г. Сахарова, А. Н. Данилин, В. Е. Лобанов, Д. А. Чермошенцев, А. Е. Шитиков, И. А. Биленко</i>	
Наносекундные импульсы в атаке на локальный осциллятор в системах квантового распределения ключа на непрерывных переменных.....	527
<i>П. А. Морозова, М. Е. Геллерт, Б. А. Наседкин</i>	
Parallel entanglement in mixed-species ion chains using optical tweezers .....	528
<i>N. A. Sterligov, O. Y. Lakhmanskaya, L. A. Akopyan, K. E. Lakhmanskiy</i>	
Влияние мертвого времени ДОФ на скорость генерации секретного ключа в протоколе КРК с НЦУ .....	530
<i>А. А. Двуреченский</i>	
Моделирование оптических свойств полупроводниковых микрорезонаторов и фотонных молекул с учетом структурных дефектов и асимметрии параметров .....	531
<i>А. В. Бучинский, А. В. Цуканов</i>	

Анализ стабильности эллиптической поляризации в вертикально-излучающем лазере .....	532
<i>Е. А. Дедков, Р. А. Шаховой</i>	
Быстрое восстановление частоты следования квантового сигнала со спутника .....	533
<i>А. Н. Чернов, А. В. Хмелев, В. Л. Курочкин</i>	
Реализация безусловного сброса сверхпроводникового кубита в основное состояние .....	536
<i>А. М. Еремеев, Ш. В. Кадырметов, А. Е. Толстобров, Г. П. Федоров, О. В. Астафьев</i>	
On the problem of searching for the optimal embedding of qubits in qudits for realization of a given circuit .....	537
<i>А. S. Nikolaeva, E. O. Kiktenko, A. K. Fedorov</i>	
Quantum topological magnetic sensor .....	538
<i>А. А. Markov, O. N. Kuliashov, A. N. Rubtsov</i>	
Активная стабилизация магнитного поля для экспериментов с холодными атомами .....	540
<i>А. Е. Руднев, Д. А. Першин, И. А. Пырх, И. Кожокару, А. В. Акимов</i>	
Simulation of ion dynamics in Surface Electrode Trap .....	541
<i>А. Podlesnyu, Y. Suleimen, L. A. Akopyan, N. Sterligov, O. Lakhmanskaya, K. Lakhmanskiy</i>	
Superfluid transition in quasi-two-dimensional disordered dipolar Fermi gases .....	543
<i>V. Y. Pinchenkova</i>	
Adiabatic Gauge Potential and quasi-integrability of Heisenberg chain .....	545
<i>P. Orlov, D. Kurlov</i>	
Symmetry breaking in a ring-shaped spinor polariton condensates .....	546
<i>К. Е. Kondratenko, I. Yu. Chestnov, S. S. Demirchyan, A. V. Kavokin</i>	
Subcycle single-qubit quantum gates — an analytical approach .....	547
<i>А. Chuchalin, A. S. Moskalenko</i>	
The light-cone approximation method in the problem of nonstationary dynamics of open quantum systems .....	549
<i>Е. А. Polyakov, G. M. Sultanov, N. S. Arefieva, D. V. Kuznetsova</i>	
<b>СЕКЦИЯ ПРИКЛАДНОЙ ГЕОФИЗИКИ .....</b>	<b>551</b>
Задержанный пампинг-эффект в подземном помещении .....	551
<i>Ю. Н. Ерошенко, Л. Б. Безруков, И. С. Карпиков, В. В. Казалов, А. К. Межох, С. В. Ингерман, В. В. Синев, Н. Ю. Агафонова, Е. А. Добрынина, Р. И. Еникеев, И. Р. Шакирьянова, Н. А. Филимонова</i>	
Мониторинг опасных геологических процессов и явлений в верхней части разреза по данным съемок 3D-инженерной сейсморазведки МОГТ разных лет. Шельф Черного моря .....	552
<i>П. А. Щуплов, А. С. Пирогова</i>	
Исследование характеристик шестиэлектродного датчика МЭТ при различных температурах .....	554
<i>А. В. Акинина, И. В. Егоров, В. М. Агафонов</i>	
Численное моделирование деформаций спирально закрученного оптоволоконного кабеля под воздействием плоских сейсмических волн .....	556
<i>Е. Чулков, С. А. Тихоцкий</i>	
Исследование различных дескрипторов границы порового пространства для его реконструкции методом восстановления фазы .....	557
<i>А. М. Черкасов, А. Н. Хлюпин, К. М. Герке</i>	
Исследование реологии недр Земли .....	558
<i>Д. О. Атогит, Т. В. Гудкова</i>	
Численное и физическое моделирование методов фотоупругости для задач геофизики .....	559
<i>И. В. Рубликов</i>	
Сравнительный анализ методов петроупругого моделирования морских слабо консолидированных осадков .....	560
<i>А. С. Дернова, А. С. Пирогова</i>	
Экспериментальное исследование и модель зависимости эффективного модуля объемного сжатия трещиноватых горных пород от текущего напряженно-деформированного состояния .....	562
<i>Н. В. Дубиня, И. В. Фокин, О. А. Тихоцкая</i>	



Частотные характеристики сейсмодатчика, плавающего на поверхности воды .....	564
<i>В. В. Шлыков, А. В. Сахаров, С. С. Ефимов, В. М. Агафонов</i>	
Исследование влияния мелкомасштабной пористости на фильтрационно-емкостные характеристики пористых сред на основе многомасштабных порово-сетевых моделей .....	566
<i>Р. А. Сиразов, К. Д. Толстыгин, А. Н. Хлюпин, К. М. Герке</i>	
Возможности применения спектрально-временного анализа для оценки частотно-зависимого затухания по данным мультимасштабной сейсморазведки .....	567
<i>А. Д. Яковенко, З. С. Замотина, А. С. Пирогова, М. Ю. Токарев</i>	
Обоснование математической модели динамического воздействия в задачах сейсмостойкости строительных конструкций.....	568
<i>Н. С. Дюкина, Т. А. Сахаров</i>	
Применение нейронных сетей по результатам лабораторных геомеханических испытаний с целью предсказания напряженно-деформируемого состояния горных пород.....	570
<i>Н. А. Егоров</i>	
Совместная интерпретация гравиметрических и магнитометрических данных: проблемы реализации и пути их решения .....	571
<i>А. Н. Левашов, Р. Л. Аргун, А. Г. Ягола, И. Э. Степанова, Д. В. Лукьяненко</i>	
Построение модели механических свойств по сейсмическим данным .....	572
<i>Е. А. Рожников</i>	
Развитие проницаемости в образцах горных пород в процессе разрушения на основе лабораторных экспериментов.....	574
<i>Д. С. Сергеев</i>	
Особенности строения и происхождения палеодолин и палеодепрессий Восточно-Приновоземельского района Карского моря по данным сейсмоакустических исследований .....	575
<i>З. С. Замотина, А. В. Старовойтов, М. Ю. Токарев, Я. Е. Терехина, А. А. Колобакин</i>	
Исследование зависимости амплитудно-частотной характеристики и чувствительности от глубины погружения высокочувствительного молекулярно-электронного гидрофона с системой компенсации внешнего гидростатического давления .....	577
<i>Я. А. Гордеев, Д. Л. Зайцев, Е. В. Агафонова</i>	
Восстановление истории изменения напряженно-деформированного состояния образцов горных пород по данным о распределении и свойствах естественных трещин.....	578
<i>Д. Д. Ермолович</i>	
Способы улучшения данных глобальных спутниковых моделей гравитационного поля Земли на акваториях с использованием априорной съемочной информации .....	579
<i>П. С. Михайлов</i>	
Применение методов машинного обучения к задаче петроупругого моделирования слабоконсолидированных отложений шельфа.....	581
<i>Н. Д. Архипов</i>	
Исследование свойств случайных неоднородных геологических многокомпонентных материалов с использованием диаграммной техники Фейнмана и уравнения Дайсона .....	582
<i>А. М. Сбойчаков</i>	
Геоакустическое поле поверхностной волны типа Рэлея в плоскостной среде .....	583
<i>Д. А. Жарков, Р. А. Жостков</i>	

---

## 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

**А. Е. Сутормина**, директор ИИТП

**В. Н. Чикин**, руководитель проектов кафедры технологического предпринимательства

---

## Организационный комитет конференции

---

**В. А. Баган**, проректор по научной работе — председатель

**Е. Д. Жебрак**, начальник отдела координации поисковых исследований — зам. председателя

*Члены организационного комитета конференции:*

**О. Ю. Белогурова-Овчинникова**, зам. директора по научно-инновационной работе ФБМФ

**А. В. Гец**, зам. директора по развитию образовательных программ ЛФИ

**Е. Р. Жукова**, руководитель проектов ОКПИ

**О. М. Замолодская**, зам. директора по учебно-методической работе ФБВТ

**И. С. Красиков**, руководитель пресс-службы

**Е. Г. Молчанов**, зам. директора по учебно-методической работе ФПМИ

**Е. И. Нехаева**, зам. директора по учебно-методической работе ИНБИКСТ

**С. О. Русскин**, зам. директора по учебно-методической работе ФРКТ

**А. В. Шадрин**, зам. директора по научно-инновационной работе ФЭФМ

**Ю. А. Борисов**, доцент кафедры систем, устройств и методов геокосмической физики

**Т. О. Соколовский**, техник кафедры управления технологическими проектами

**Н. Н. Грибова**, зам. руководителя департамента иностранных языков по административной работе

**В. А. Шульгинов**, ведущий научный сотрудник центра междисциплинарных исследований

**И. Г. Шомполов**, ведущий математик межвузовского центра воспитания и развития талантливой молодежи в области естественно-математических наук «Физтех-центр»

# Секция общей физики

Председатель: А. В. Максимычев (д. ф.-м. н., зав. кафедрой)

Зам. председателя: С. В. Виноградов (к. ф.-м. н., доцент)

Секретарь: В. А. Яворский (к. ф.-м. н.)

Дата: 08.04.2023

Время: 10:00

УДК 621.384.6.01

## Проект нового Нуклотрона (JINR)

*Е. Д. Цылаков<sup>1,2</sup>, Ю. Н. Филатов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт ядерных исследований (ОИЯИ)

Стабилизация и управление спином требуют внедрения в структуру синхротрона мощных соленоидов, производящих поворот оси поляризации вокруг продольного движения. Применение соленоидов приводит к изменению структурных функций ускорителя и появлению связи бетатронных движений.

Необходимость управления и стабилизации обусловлена следующим.

1. Проведением экспериментов по поляризации частиц на кольце.
2. Ускорением поляризованных частиц без потери поляризации для переброса в коллайдер NICA.
3. Выводом частиц на fix-target эксперимент с требуемой поляризацией.

В связи с тем, что канал Нуклотрона не подвержен изменению, мы ограничены в реализации систем по управлению спином. Поэтому предлагается вариант по модернизации структуры Нуклотрона на базе Cosine-Theta магнитов.



Рис. 1. Суперпериод структуры синхротрона с частичной змейкой

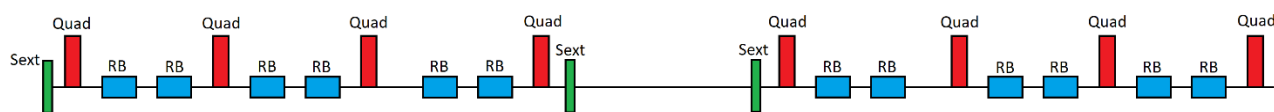


Рис. 2. Суперпериод структуры синхротрона с пустым прямолинейным промежутком

Отсутствие ярма магнитов позволяет экономить место по периметру синхротрона за счет увеличения, к примеру, дипольного поля до 4 Т. Таким образом, реалистично поднять энергию частиц выше текущего технологического предела, при этом сэкономив место.

Максимальные градиент и величина дипольного поля будут определяться в результате создания прототипов магнитов.

На рис. 1–2 изображены схемы заполнения суперпериодов с соленоидами и в их отсутствие. Дополнительно имеется место для косых квадрупольных и секстипольных магнитов. Пустой промежуток имеет длину 6,9 м, длина дипольных магнитов — 1,05 м, длина квадрупольных магнитов — 0,6 м.

Количество поворотных магнитов равно 96. Также в сравнении с текущей структурой свободный промежуток не содержит в центре квадруполь как часть структуры FODO. Достигается данный эффект за счет длинной растяжки.

Подавление связи движений реализуется косыми квадрупольями длиной 0,15 м, повернутых по каждую сторону от соленоида на углы  $\pi/4$ ,  $-\pi/4$ . Полную потерю связи по периметру они не дают, но выступают корректирующим элементом.

Т а б л и ц а 1. Градиенты полей в квадрупольях

	1 семейство	2 семейство	3 семейство
Ячейки с соленоидами, $\frac{\nabla B}{B\rho}$	0,51	0,442	0,21
Ячейки без соленоидов, $\frac{\nabla B}{B\rho}$	0,53	0,39	0,19

Суперпериоды неравнозначны друг относительно друга из-за наличия соленоидов, поэтому 6 суперпериодов без соленоидов запитываются в соответствии с разделением по семействам (рис. 2), в оставшихся двух суперпериодах (рис. 1) квадрупольи имеют градиенты, отличающиеся на малую величину (табл. 1). Малая отстройка квадрупольей позволяет настраивать синхротрон с включенными соленоидами. На рис. 3–4 представлены структурные функции синхротрона при отключенных и включенных соленоидах. Оговоримся, когда соленоиды выключены, ячейки без соленоидов подобны ячейкам с соленоидами.

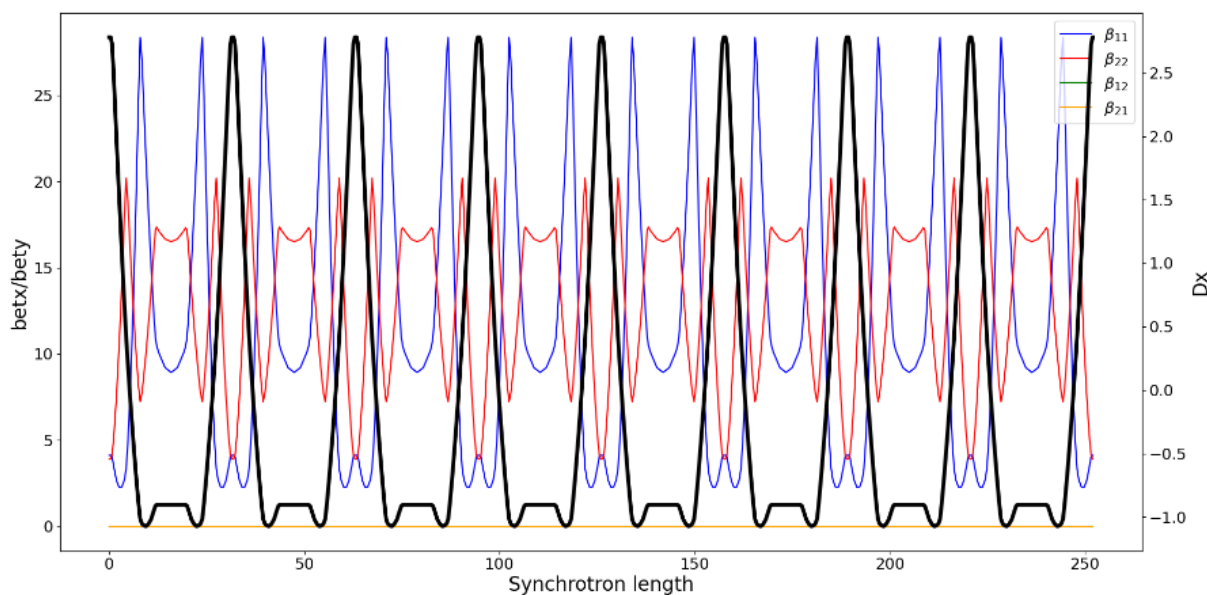


Рис. 3. Структурные функции синхротрона при отключенных соленоидах

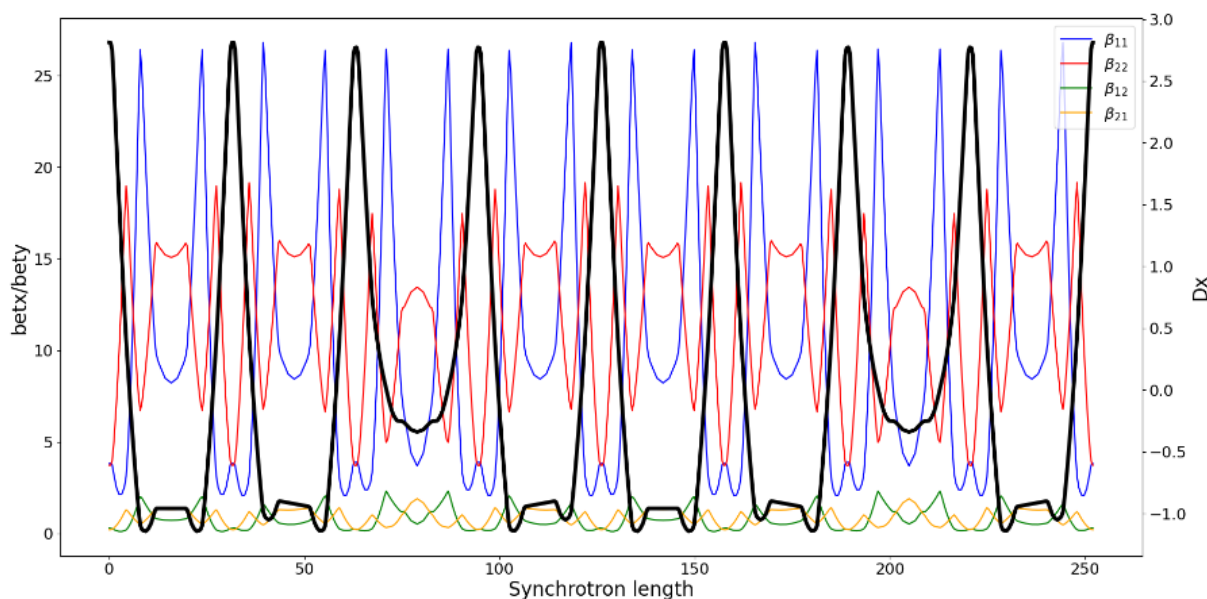


Рис. 4. Структурные функции синхротрона с включенными соленоидами

Преимущества структуры:

- 1) обеспечивается режим спиновой прозрачности для протонов и  ${}^3\text{He}$ ;
- 2) понятная система согласования суперпериодов;
- 3) свободные промежутки имеют длину 6,9 м за счет применения триплетовой структуры фокусировки;
- 4) достаточно места в арках для всей диагностики, корректоров и дополнительных элементов;
- 5) можно уйти в тяжелоионной моде за границу ныне технически реализуемой магнитной жесткости.

Недостатки структуры:

- 1) стоит вопрос в разработке соленоидов с быстрым поднятием поля;
- 2) неотработанная технология изготовления магнитов.

### Литература

1. *Kolomensky A. A., Lebedev A. N.* Theory of cyclic accelerators // Phys. Today. 1966. V. 20. P. 117–118.
2. *Filatov Y. N.* [et al.]. Spin response function technique in spin-transparent synchrotrons // Eur. Phys. J. C. 2020. V. 80: 778. DOI: 10.1140/epjc/s10052-020-8344-5.

УДК 543.429.23

## Оптимизация параметров импульсной последовательности КПМГ для задач ЯМР-метабономики

*Д. А. Федоров, А. М. Перепухов, А. В. Максимычев*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Состояние здоровья человека может быть охарактеризовано при помощи метаболического анализа крови. Перспективным методом определения компонентного состава смесей является спектроскопия ЯМР.

В общем случае скорость поперечной релаксации для системы не взаимодействующих друг с другом спинов определяется резонансной частотой  $\omega_0$  и временем корреляции  $\tau_c$ :

$$\frac{1}{T_2} = \gamma^2 \overline{|B'(t)|^2} \left( \frac{\tau_c}{1 + \omega_0^2 \tau_c^2} + \tau_c \right), \quad (1)$$

где  $T_2$  — время поперечной релаксации,  $\gamma$  — гиромагнитное отношение,  $B'(t)$  — флуктуирующее локальное магнитное поле, а  $\tau_c$  определяется как

$$\tau_c = \frac{4\pi\eta a^3}{3kT}. \quad (2)$$

Таким образом, в случае высокой подвижности молекулы  $\frac{1}{T_2} \sim \tau_c \sim a$ .

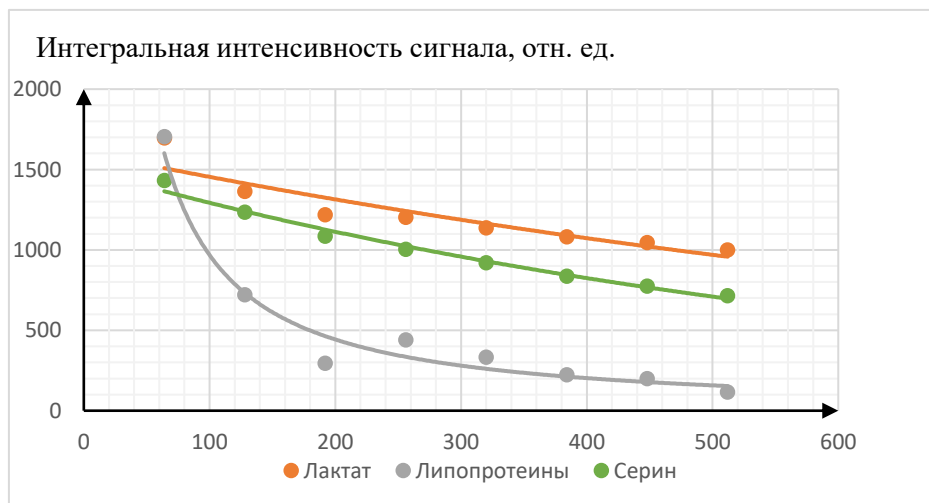


Рис. 1. Зависимость интегральной интенсивности сигналов различных молекул в смеси от параметра  $L_4$

Для получения спектра ЯМР-метаболитов используется импульсная последовательность КПМГ. Введем обозначения:  $ns$  — количество сканов,  $L4$  — количество  $\pi$ -импульсов в последовательности КПМГ. Увеличение  $L4$  уменьшает интенсивность сигналов примесей тяжелых молекул и увеличивает время эксперимента (рис. 1). На рис. 1 приведена зависимость интенсивности сигналов некоторых метаболитов и липопротеинов разной плотности от величины параметра  $L4$ . Из рисунка видно, что интенсивность сигнала примесей липопротеинов уменьшается заметно быстрее с ростом параметра  $L4$ . Кроме того, данный параметр влияет на соотношение сигнал/шум. В данном исследовании экспериментально изучалось влияние этих параметров на качество спектра (рис. 2). На рис. 2 приведены зависимости соотношения сигнал/шум от  $L4$  и  $ns$ . Из графика следует, что отношение сигнал/шум уменьшается с ростом  $L4$  и увеличивается с ростом  $ns$ , причем зависимость от  $L4$  менее ярко выражена.

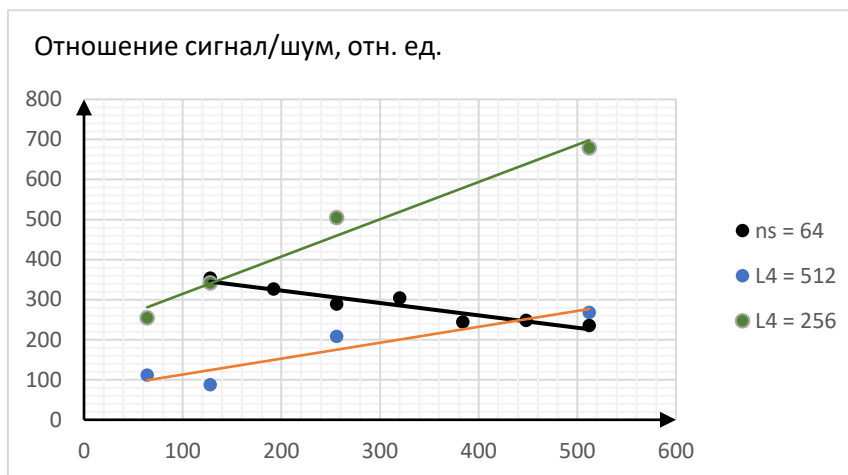


Рис. 2. Зависимость отношения сигнал/шум в спектрах образца от параметра  $L4$  при постоянном  $ns = 64$  и от  $ns$  при постоянных  $L4 = 512, 256$

Таким образом, были подобраны параметры эксперимента, а именно  $L4 = 256, ns = 512$ , при которых данный метод позволяет определить различие в размерах молекул. Оптимизация вышеперечисленных характеристик делает методы ЯМР перспективными в области метаболомики.

### Литература

1. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. — М.: Мир, 1992.
2. Larive C. K., Barding G. A. Jr., Dinges M. M. NMR spectroscopy for metabolomics and metabolic profilin // Anal. Chem. 2015. V. 87(1). P. 133–146. DOI: 10.1021/ac504075g.

УДК 535.53

### Моделирование кинетики энергообменных процессов в плазме Ar/He

Р. А. Курамшин<sup>1,2</sup>, А. П. Торбин<sup>2</sup>, М. И. Свистун<sup>2</sup>, М. В. Загидуллин<sup>2</sup>, А. К. Чернышов<sup>2</sup>, П. А. Михеев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Самарский филиал (СФ ФИАН)

Развитие гибридных газозаменных/твердотельных лазеров перспективно для создания высокоэффективных мощных лазерных систем с высоким качеством излучения, способным распространяться на большие расстояния. Одной из наиболее перспективных лазерных систем, суммирующих и преобразующих излучение лазерных диодов в мощное излучение высокого качества, на сегодняшний день является лазер на метастабильных атомах инертных газов с оптической накачкой (ЛОНИГ) [1–3]. Развитие данной лазерной системы требует точного знания кинетических констант энергообменных процессов, протекающих в плазме активной среды. Наиболее популярной системой ЛОНИГ является Ar\*/He по причине наименьшей стоимости составляющих инертных газов и наибольшего количества открытой информации о кинетических и спектральных константах метастабильного аргона. Целью данной работы было создание кинетической модели, предназначенной для определения констант скорости энергообменных

процессов с участием метастабильного аргона  $\text{Ar}^*$  и гелия, и сравнение модели с экспериментальными данными.

Кинетическая модель была разработана в программном пакете COMSOL Multiphysics. Моделирование процессов накачки, заселения и тушения уровней проводилось путем решения уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{d[\text{Ar}(2p_i)]}{dt} &= \sum_{j \neq i} \left( [\text{Ar}(2p_j)] (k_{j,i}[\text{He}] + A_{j,i}) - [\text{Ar}(2p_i)] (k_{i,j}[\text{He}] + A_{i,j}) \right) - \\ &\quad - [\text{Ar}(2p_i)] (k_{i,1s_5}[\text{He}] + A_{i,1s_5} + k_{i,1s_4}[\text{He}] + A_{i,1s_4}) + \delta_{i,q} P(t) \left( [\text{Ar}(1s_5)] - \frac{g_{1s_5}}{g_{2p_q}} [\text{Ar}(2p_q)] \right), \\ \frac{d[\text{Ar}(1s_n)]}{dt} &= \sum_{m \neq n} \left( [\text{Ar}(1s_m)] (k_{m,n}[\text{He}] + A_{m,n}) - [\text{Ar}(1s_n)] (k_{n,m}[\text{He}] + A_{n,m}) \right) + \\ &\quad + \sum_j \left( [\text{Ar}(2p_j)] (k_{j,n}[\text{He}] + A_{j,n}) - \delta_{n,4} [\text{Ar}(1s_n)] A_{n,0} - \delta_{n,5} P(t) \left( [\text{Ar}(1s_5)] - \frac{g_{1s_5}}{g_{2p_q}} [\text{Ar}(2p_q)] \right) \right), \end{aligned}$$

где  $i, j = 6, 7, 8, 9, 10$ ;  $m, n = 4, 5$ ;  $[\text{Ar}(2p_i)]$  — концентрация  $2p_i$ -уровня;  $k_{j,i}$  — константа скорости реакции  $2p_j \rightarrow 2p_i$ ;  $[\text{He}]$  — концентрация гелия;  $k_{i,1s_5}$  — константа скорости реакции  $2p_i \rightarrow 1s_5$ ;  $A_{i,1s_5}$  — коэффициент Эйнштейна  $2p_i \rightarrow 1s_5$ ;  $k_{i,1s_4}$  — константа скорости реакции  $2p_i \rightarrow 1s_4$ ;  $A_{i,1s_4}$  — коэффициент Эйнштейна  $2p_i \rightarrow 1s_4$ ;  $\delta$  — символ Кронекера;  $P(t)$  — временной профиль лазерного импульса, полученный аппроксимацией экспериментального импульса;  $g_{1s_5}$  — статистический вес уровня  $1s_5$ , равный 5;  $g_{2p_q}$  — статистический вес уровня  $2p_q$ ;  $q$  — уровень на который производится оптическая накачка. Процесс накачки описан слагаемыми с  $P(t)$ , в уравнении для  $2p_i$  уровней, на который накачивают, для  $1s_n$  уровней, с которого накачка производится. Заселение уровня описано положительными слагаемыми, тушение — отрицательными.

Связь констант прямых и обратных реакций в модели обеспечивается принципом детального равновесия:

$$k_{l,u} = k_{u,l} \frac{g_u}{g_l} \exp\left(-\frac{E_u - E_l}{kT}\right),$$

где  $k_{l,u}$  — константа скорости обратной реакции;  $k_{u,l}$  — константа скорости прямой реакции;  $g_l$  — статистический вес нижнего уровня;  $g_u$  — статистический вес верхнего уровня;  $E_u$  — энергия верхнего уровня;  $E_l$  — энергия нижнего уровня.

Для проверки модели и определения констант скорости процессов с участием  $\text{Ar}^*$  был проведен эксперимент с использованием метода лазерно-индуцированной флуоресценции на установке, описанной в [4]. Лазерное излучение от перестраиваемого  $\text{Ti} : \text{Sa}$  лазера 772,4 нм обеспечивало накачку на переходе  $\text{Ar}^* 1s_5 \rightarrow 2p_7$ . Регистрация эмиссионных сигналов метастабильного аргона  $2p_6 \rightarrow 1s_5$ ,  $2p_8 \rightarrow 1s_5$  и  $2p_9 \rightarrow 1s_5$  проводилась одновременно по трем каналам при давлении в камере  $P = 350$  Торр и температуре газа в зоне разряда  $T = 420$  К. Температура газа определялась бесконтактно методом перестраиваемой диодно-лазерной спектроскопии по уширению линии поглощения аргона  $1s_5 \rightarrow 2p_{10}$  на длине волны 912,3 нм. Экспериментальные сигналы и результаты моделирования показаны на рис. 1.

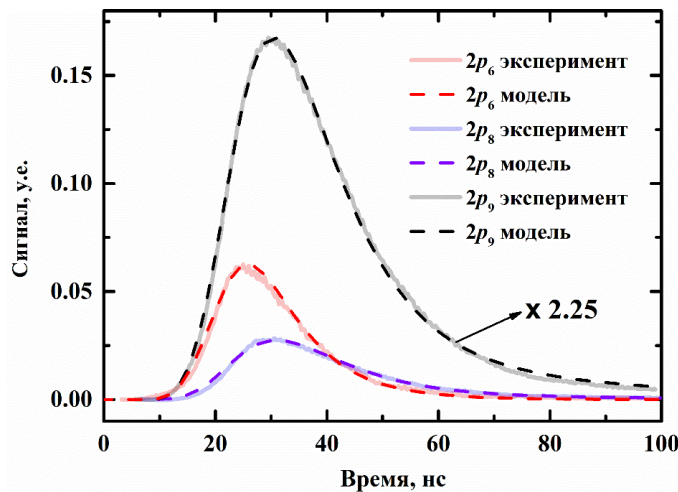
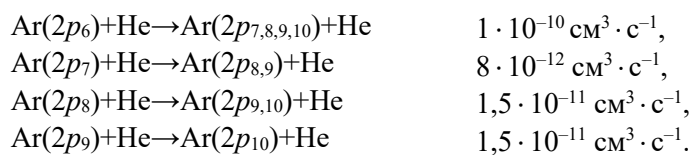


Рис. 1. Сигналы излучения метастабильного аргона в смеси с гелием в сравнении с моделью



Лучшее согласие модели со всеми тремя экспериментально полученными сигналами было достигнуто при следующих подобранных значениях суммарных констант скорости столкновительной релаксации между  $p$ -уровнями:



Однако при данных значениях констант согласие модели с экспериментом достигнуто только по форме, но не по амплитуде, что на данном этапе не позволяет разделить каналы тушения  $p$ -состояний и измерить их коэффициенты ветвления. В частности, сигнал  $2p_9 \rightarrow 1s_5$  необходимо увеличить в 2,25 раза для совпадения с моделью. Тем не менее полученные значения констант близки к измеренным ранее [5], что подтверждает правильность выбранного подхода. Особенностью нашей работы по сравнению со схожими по тематике является прямое измерение температуры газа в плазме разряда, что позволит в дальнейшем получить температурные зависимости констант скорости процессов столкновительной передачи энергии в смеси  $\text{Ar}^*/\text{He}$ .

### Литература

1. Han J., Heaven M. C. Gain and lasing of optically pumped metastable rare gas atoms // Opt. Lett. 2012. V. 37(11). P. 2157–2159.
2. Sanderson C. R., Ballmann C. W., Han J. [et. al.]. Demonstration of a quasi-CW diode-pumped metastable xenon laser // Opt. Express. 2019. V. 27(24). P. 36011–36021.
3. Sun P., Zuo D., Mikheyev P. A., Han J., Heaven M. C. Time-dependent simulations of a CW pumped, pulsed DC discharge Ar metastable laser system // Opt. Express. 2019. V. 27(16). P. 22289–22301.
4. Курамшин Р. А. [и др.] Измерение констант скорости энергообменных процессов в плазме AR/HE // XX Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике. посвященный 100-летию со дня рождения Н. Г. Басова, Самара, 08–12 ноября 2022 г. — М.: Тривант, 2022. P. 402–409.
5. Han J., Heaven M. C. Kinetics of optically pumped Ar metastables // Opt. Lett. 2014. V. 39(22). P. 6541–6544.

УДК 543.429.23

### Применение методов ЯМР-спектроскопии высокого разрешения для анализа молекулярного строения новых P, S-бидентатных амидофосфитных лигандов

**И. В. Чуцелкин<sup>1</sup>, Я. П. Битяк<sup>2</sup>, Д. А. Федоров<sup>2</sup>, А. М. Перепухов<sup>2</sup>, А. В. Максимычев<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Рязанский государственный университет им. С. А. Есенина

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время индукторы хиральности широко используются в металлокомплексном катализе для асимметричного синтеза ценных технических и биологически важных соединений [1–3]. Амидофосфиты образуют класс часто используемых хиральных лигандов фосфитного типа, характеризующихся универсальностью, доступностью и высокой эффективностью в широком диапазоне каталитических процессов [4–7].

Одним из основных способов исследования молекулярного строения веществ являются различные методы ЯМР-спектроскопии высокого разрешения: одномерные дают оценку соотношения различных функциональных групп, двумерные — представление об их взаимодействии и относительном положении.

Для трех P,S-бидентатных амидофосфитных лигандов, синтезированных по ранее описанной схеме [8], были получены и проанализированы спектры ЯМР высокого разрешения: одномерные —  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{31}\text{P}$ , АРТ — и двумерные — HSQC, HMBC, COSY. В ходе работы использовались таблицы химических сдвигов [9–10]. На их основе составлена структура лигандов и дано их строение (рис. 1). Дано соотнесение между химическими сдвигами в спектрах  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  (в ppm), а также величинами констант спин-спинового взаимодействия (гомоядерные  $J_{\text{HH}}$ , гетероядерные  $J_{\text{CH}}$  и  $J_{\text{CP}}$ , в Гц), с молекулярным строением в общем структурном элементе изученных молекул (рис. 2).

Таким образом, с применением методов ЯМР-спектроскопии высокого разрешения было определено молекулярное строение новых P, S-бидентатных амидофосфитных лигандов.

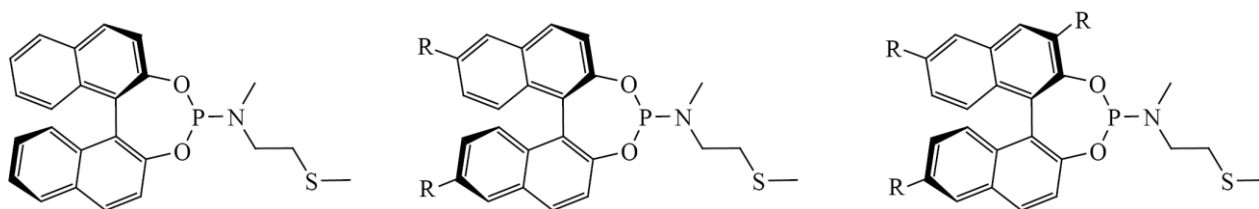


Рис. 1. Структура трех изученных P, S-бидентатных амидофосфоритных лигандов, где R — адамант-1-ил

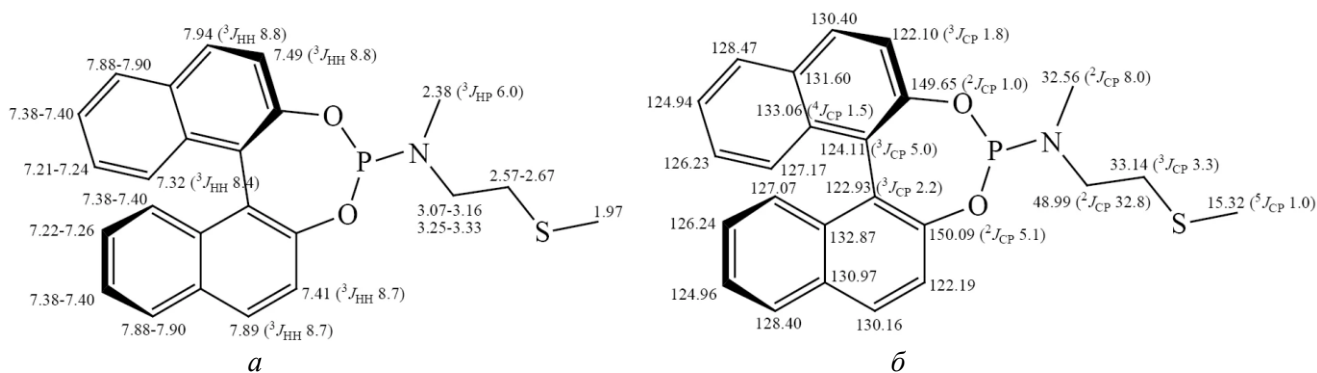


Рис. 2. Соотнесение химических сдвигов в спектрах  $^1\text{H}$  (а) и  $^{13}\text{C}$  (б) с молекулярным строением в общем структурном элементе изученных молекул

## Литература

1. *Teichert J. F., Feringa B. L.* Phosphoramidites: privileged ligands in asymmetric catalysis // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2010. V. 49(14). P. 2486–2528.
2. *Privileged Chiral Ligands and Catalyst* / Ed. Q.-L. Zhou. — Wiley, 2011.
3. *Fu W., Tang W.* Chiral monophosphorus ligands for asymmetric catalytic reactions // *ACS Catal.* 2016. V. 6(8). P. 4814–4858.
4. *Chiral ligands. Evolution of ligand libraries for asymmetric catalysis* / Ed. M. Dieguez. — Taylor & Francis Group, 2021.
5. *Crepy K. V. L., Imamoto T.* Recent developments in catalytic asymmetric hydrogenation employing P-Chirogenic diphosphine ligands // *Adv. Synth. Catal.* 2003. V. 345(1–2). P. 790–101.
6. *Lu Z., Ma S.* Metal-catalyzed enantioselective allylation in asymmetric synthesis // *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 2008. V. 47(2). P. 258–297.
7. *Transition metal catalyzed enantioselective allylic substitution in organic synthesis* / Ed. U. Kazmaier. — Berlin: Springer-Verlag, 2012.
8. *Gavrilov K. N.* [et al.]. P,S-Bidentate phosphoramidites with (Ra)-BINOL core in palladium-catalyzed asymmetric allylic substitution // *Rus. J. of G. Chem.* 2022. V. 92(13). P. 2612–2619.
9. *Fulmer G. R.* [et al.]. NMR chemical shifts of trace impurities: common laboratory solvents, organics, and gases in deuterated solvents relevant to the organometallic chemist // *Organometallics.* 2010. V. 29. P. 2176–2179.
10. *Morris L. N., Pustinger J. V., Strobel J.* Phosphorus-31 nuclear magnetic resonance chemical shifts of phosphorus compounds // *J. Chem. Eng. Data.* 1964. V. 9(2). P. 167–170.

УДК 544.034.4

## Конформация молекул полимеров в растворах для диффузионной ЯМР-спектроскопии

*А. Р. Пашутин<sup>1</sup>, А. М. Перепухов<sup>1</sup>, В. А. Иванова<sup>1</sup>, Л. И. Меньшиков<sup>1,2,3</sup>, П. Л. Меньшиков<sup>1,2,3</sup>,  
А. В. Максимычев<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН

Полимеры имеют широкое применение в фармацевтике, в частности, нужны при создании мицеллярных наноконтейнеров для лечащих веществ. В последнем случае при сборке, а также для

осуществления точечной доставки лекарства в организме, необходимо знать и учитывать конформацию и ее преобразования у используемых молекул полимеров.

Методы DOSY хорошо подходят для исследования макромолекул в растворах. DOSY, совмещенный с протонной спектроскопией ЯМР, позволяет определять коэффициенты самодиффузии молекул исследуемых веществ, что, в свою очередь, дает возможность рассчитывать их размер и молекулярную массу.

Для частиц, имеющих форму глобулы, радиус может быть определен из уравнения Стокса–Эйнштейна:

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta r}, \quad (1)$$

где  $D$  — коэффициент диффузии,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура,  $\eta$  — вязкость жидкости,  $r$  — радиус частицы.

Методом DOSY коэффициенты диффузии растворенных частиц определяются по спаду сигнала в градиенте магнитного поля:

$$\frac{I}{I_0} = e^{-D\gamma^2 g^2 \delta^2 \Delta'}, \quad (2)$$

где  $I$  — интенсивность сигнала,  $I_0$  — интенсивность сигнала в начальный момент времени,  $\gamma$  — гиромагнитное соотношение,  $g$  — амплитуда импульса градиента магнитного поля,  $\delta$  — длительность импульса градиента магнитного поля,  $\Delta'$  — диффузионная задержка.

Согласно теории, короткие полимерные молекулы не свернуты в случайный клубок, а имеют форму стержня. В этом случае движение молекулы вперед торцом и боковой стороной будет происходить со скоростью, различающейся, согласно расчетам, приблизительно в два раза. Исследования М. Алесси и др. [1] показывают, что для полиэтиленгликолей данная конформация действительно достижима в растворах изомасляной кислоты и ее смесях с водой.

Исходя из теории, в результате исследования методом DOSY для стержневых молекул должны наблюдаться два или больше различных диффузионных коэффициента.

Исследовались полилактиды со средним числом звеньев 14 и 33 и полиэтиленгликоли со средним числом звеньев 5, 14, 28, 56, 111 и 556. Растворителями выступали оксид дейтерия  $D_2O$ , дейтерированный диметилсульфоксид  $DMSO-D_6$ , дейтерированный хлороформ  $CDCl_3$ . Опыты производились при комнатной температуре. Работа выполнена с использованием ЯМР-спектрометра высокого разрешения Varian Inova 500 с резонансной частотой для ядер  $^1H$  500 МГц.

Обнаружено, что для полилактида со средним числом звеньев 14 наблюдался двухэкспоненциальный спад сигнала (см. табл. 1), что говорило о двух коэффициентах диффузии для каждого вещества одновременно, различающихся приблизительно в два раза; для полилактида со средней длиной цепи 33 звена, напротив, наблюдался лишь один коэффициент диффузии. Это полностью соответствует теории и показывает возможность использования метода DOSY в исследованиях конформации веществ.

Т а б л и ц а 1. Результаты расчетов коэффициентов самодиффузии для молекул полилактида различной длины на основе экспериментальных данных. В эксперименте исследовались растворы гомополимеров со средней длиной цепи 14 и 33 звена в ДМСО с объемной долей 50%

Число звеньев	Число экспонент	Значение предэкспоненты 1	D1, см <sup>2</sup> /с	Значение предэкспоненты 2	D2, см <sup>2</sup> /с
14	2	0,69	0,87	0,32	1,5
33	1	1,01	0,7		

## Литература

1. Alessi M. L. [et al.] Helical and coil conformations of poly(ethylene glycol) in isobutyric acid and water // *Macromolecules*. 2005. V. 38. P. 9333–9340.

## Поверхностная потенциальная энергия в невязкой жидкости

К. Ю. Лапина

Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова

Исследование волновых движений, распространяющихся вдоль свободных поверхностей жидкости или вдоль границы раздела сплошных сред, представляет практический и академический интерес. Волновым процессам посвящены классические труды и монографии [1] и современные исследования. В работе [2] рассмотрены дисперсионные соотношения, возникающие в системе двух полубесконечных стратифицированных жидкостей. В исследовании [3] рассмотрены поверхностные волновые течения в вязких однородных и стратифицированных жидкостях и показано, что в вязких жидкостях существует новый (по сравнению с моделями идеальных жидкостей) тип решения, описывающий тонкие сопутствующие структуры. В исследовании [4] обращается внимание на необходимость учета энергии, в том числе поверхностной, при исследовании волновых процессов. Настоящая работа посвящена исследованию доступной поверхностной потенциальной энергии при распространении волнового движения вдоль свободной поверхности идеальной жидкости в различных моделях. Идеальная полубесконечная жидкость рассматривалась в плоской постановке в различных моделях. Исследовалась однородная жидкость и равномерно стратифицированная с экспоненциальным профилем плотности  $\rho = \rho_{00}(\exp(-z/\Lambda) + s(x, z, t))$  ( $\rho_{00}$  — значение плотности на равновесном уровне  $z=0$ ,  $\Lambda = |d \ln \rho / dz|^{-1}$  — масштаб стратификации, а  $s(x, z, t)$  — функция, описывающая отклонение плотности от равновесного значения без указания природы этого отклонения) жидкость. Отдельно исследовалось влияние поверхностного электрического заряда на поверхностную энергию, связанную с искривлением свободной поверхности при распространении капиллярно-гравитационных волн.

При распространении вдоль свободной поверхности синусоидальной волны отклонение поверхности от равновесного положения  $\zeta(x, t)$  описывается соотношением

$$\zeta(x, t) = A \frac{k_x}{\omega} e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (1)$$

Удельную площадь поверхности волны находим с помощью криволинейного интеграла

$$\int_0^\lambda \sqrt{1 - (\partial_t \zeta)^2} dt, \quad (2)$$

а доступную удельную поверхностную потенциальную энергию определим следующим образом:

$$E = \sigma \int_0^\lambda \sqrt{1 - (\partial_t \zeta)^2} dt. \quad (3)$$

Построим зависимость доступной поверхностной потенциальной энергии от частоты волнового движения для жидкости с различной степенью стратификации (рис. 1) и с различным значением безразмерного поверхностного электрического заряда  $W$  (рис. 2).

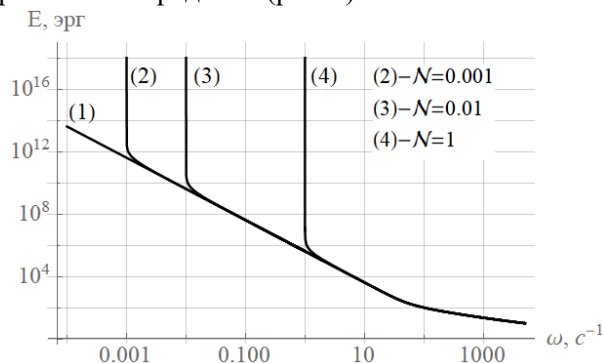


Рис. 1. Зависимость доступной потенциальной поверхностной энергии  $E$  ( $a$  — полная область;  $b$  — увеличенная область) нестратифицированной (1) и стратифицированной (2–4) жидкости от частоты волнового движения

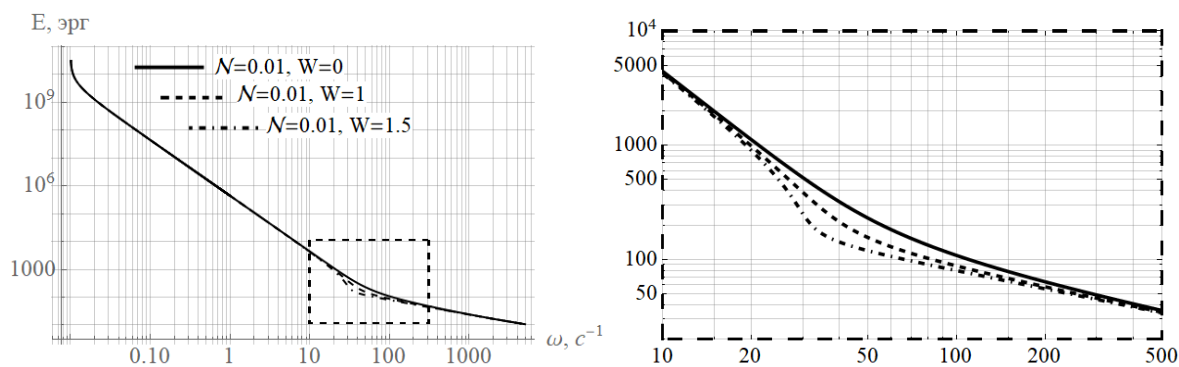


Рис. 2. Зависимость доступной потенциальной поверхностной энергии  $E$  ( $a$  — полная область;  $b$  — увеличенная область) стратифицированной жидкости с поверхностным электрическим зарядом от частоты волнового движения

Были получены зависимости доступной поверхностной потенциальной энергии от частоты и длины волны. Исследовано влияние экспоненциальной стратификации жидкости и наличия поверхностного электрического заряда на доступную поверхностную потенциальную энергию. Показано, что увеличение стратификации приводит к более быстрому росту доступной поверхностной энергии при уменьшении частоты, а увеличение поверхностного электрического заряда, наоборот, уменьшает доступную энергию. С другой стороны, появление заряда приводит к появлению дополнительной электрической поверхности, влияние которой в настоящей работе не учитывалось.

### Литература

1. Уизем Д. Линейные и нелинейные волны. — М.: Мир, 1977.
2. Чашечкин Ю. Д., Очиров А. А., Лапина К. Ю. Поверхностные волны вдоль границы раздела устойчиво стратифицированных жидких сред // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2022. Т. 23. Вып. 6. С. 66–80.
3. Chashechkin Y. D., Ochirov A. A. Periodic waves and ligaments on the surface of a viscous exponentially stratified fluid in a uniform gravity field // Axioms. 2022. V. 11(8): 402.
4. Chashechkin Y. D. Foundations of engineering mathematics applied for fluid flows // Axioms. 2021. V. 10(4): 286.

УДК 537.635

### Определение компонентного состава и диффузионных характеристик смесей блок-сополимеров с гомополимерами методами спектроскопии ЯМР

**В. А. Иванова<sup>1</sup>, А. М. Перепухов<sup>1</sup>, Л. И. Меньшиков<sup>1,2</sup>, П. Л. Меньшиков<sup>1,2</sup>, А. В. Максимычев<sup>1</sup>,  
Ю. А. Пучкова<sup>2</sup>, Н. Г. Седуш<sup>2</sup>, С. Н. Чвалун<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Блок-сополимеры на основе биосовместимых и биоразлагаемых полимеров являются основой создания наноконтейнеров мицеллярного типа для адресной доставки лекарственных средств. Для получения наноконтейнеров, адаптированных под разные лекарственные средства, варьируют условия синтеза блок-сополимеров. В связи с этим требуется контроль структуры и состава полученных в ходе синтеза продуктов, который зачастую осуществляется методами спектроскопии ЯМР высокого разрешения [1].

Диффузионные методы спектроскопии ЯМР (DOSY) имеют высокий потенциал в исследовании смесей блок-сополимеров и соответствующих гомополимеров, чьи спектры в значительной мере перекрываются. Использование эксперимента DOSY позволяет легко сопоставлять его результаты с данными протонного спектра, что, в свою очередь, повышает точность оценки характеристик целевых компонентов — блок-сополимеров. Однако из-за сложностей в математической обработке результатов DOSY использование этого метода для подобных задач слабо освещено в научной литературе [2].

Для проверки чувствительности этого метода (как с экспериментальной, так и с математической точек зрения) была проведена серия диффузионных экспериментов на образцах смесей блок-сополимеров mPEG<sub>113</sub>-PLA<sub>14(33)</sub> с гомополимерами PLA<sub>14(33)</sub>, для которых известно количество добавленного гомополимера. Результаты этой серии отображены на рис. 1.

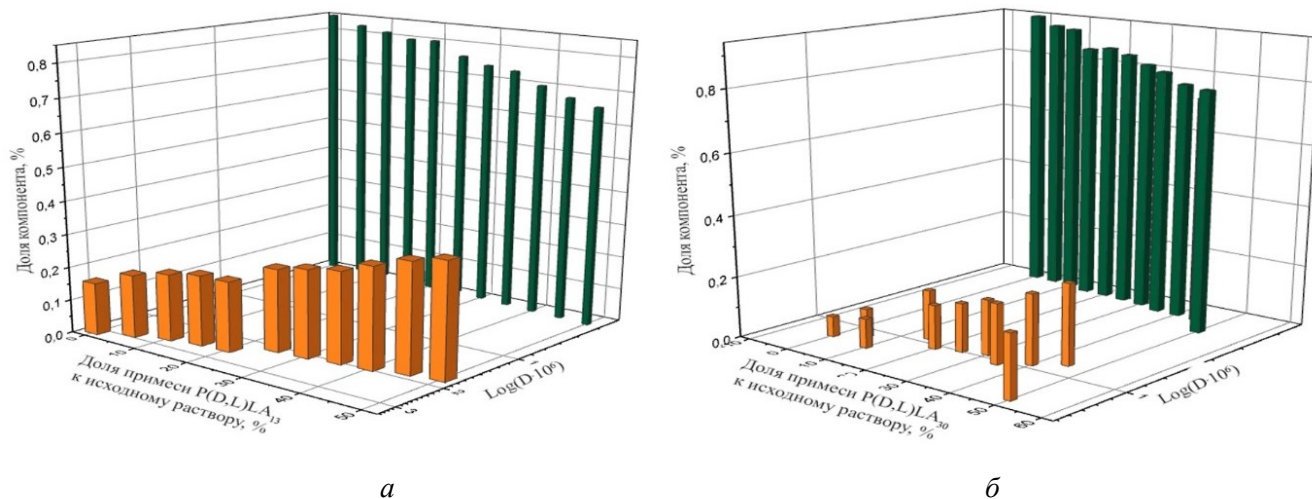


Рис. 1. Гистограмма компонентного состава образцов с разной долей добавленного полилактоида (а) для P(D,L)LA14 и P(D,L)LA30 (б) по отношению к исходному раствору; оранжевые столбцы соответствуют полилактоиду, темно-зеленые — блок-сополимеру

В сериях фиксируется стабильный рост определяемой доли гомополимерного компонента, что коррелирует с количеством добавленного подвижного компонента. Кроме того, в исходных растворах обнаружен гомополимерный полилактоид (около 15% для mPEG<sub>113</sub>-P(D,L)LA<sub>14</sub> и 7% для mPEG<sub>113</sub>-P(D,L)LA<sub>33</sub>).

Таким образом, использование диффузионного эксперимента DOSY для смесей блок-сополимеров с соответствующими гомополимерами позволяет оценить не только коэффициенты самодиффузии входящих компонентов, но и долю каждого из них, что является критичным в контроле продуктов синтеза блок-сополимеров для создания наноконтейнеров с адресной доставкой лекарственных средств. Для растворов чистого гомополимера показана возможность возникновения двух диффузионных составляющих со значениями самодиффузии, отличающимися в два раза.

### Литература

1. Bovey F. A., Mirau P. A. NMR of Polymers. — New York: Academic Press, 1996.
2. Stilbs P. Diffusion and Electrophoretic NMR. — Berlin; Boston: De Gruyter, 2019. DOI: 10.1515/9783110551532.

УДК 539.126.6

## Изучение возможности восстановления гиперонов в эксперименте BM@N

Р. К. Барак<sup>1,2</sup>, С. П. Мерц<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

<sup>2</sup>Лаборатория физики высоких энергий им. В. И. Векслера и А. М. Балдина,

Международная межправительственная организация «Объединенный институт ядерных исследований»

Релятивистские столкновения тяжелых ионов позволяют изучать ядерную материю в случаях экстремальной плотности и температуры. Во время таких столкновений ядерная материя нагревается и сжимается за очень короткий промежуток времени. При достаточно высоких температурах или в случае большей плотности адроны «плавятся», а составляющие (кварки и глюоны) образуют так называемую кварк-глюонную плазму (КГП). В физике высоких энергий рождение частиц с ненулевой странностью в релятивистских столкновениях тяжелых ионов является характерным признаком формирования кварк-глюонной плазмы (КГП). Данная работа сконцентрирована на исследовании вопроса восстановления параметров частиц с этой компонентой (гиперонов) в эксперименте BM@N (Baryonic Matter at Nuclotron) [1, 2]. Данный эксперимент реализуется в Объединенном институте ядерных исследований в подмосковном городе Дубна.

В феврале 2023 г. завершился первый экспериментальный сеанс с пучком ксенона ( $^{124}\text{Xe}^{54+}$ ) на установке BM@N. На данный момент идет процесс обработки данных и их подготовки к дальнейшему физическому анализу. Поэтому в работе для анализа рождения гиперонов использовались данные, полученные с помощью Монте-Карло генератора DCMSMM [3]. В работе было смоделировано 100 000 событий,

проведена реконструкция траекторий частиц и разработаны и реализованы в программном пакете VmnRoot математические алгоритмы восстановления траекторий лямбда-гиперонов по каналу распада на протон и отрицательный пи-мезон. Похожая процедура была проделана для восстановления траекторий короткоживущих нейтральных каонов по каналу распада на положительный и отрицательный пи-мезоны. Алгоритм основан на переборе пар частиц с разными знаками, вычислении инвариантной массы и наложении ряда геометрических ограничений на параметры каждой пары.

На рис. 1 представлены массовые распределения пар протона и отрицательного пи-мезона. Наблюдается пик от лямбда-гиперонов, который был фитирован и извлечены масса (1,115 ГэВ) и ширина (2 МэВ), хорошо согласующиеся с теорией. Также были вычислены соотношение сигнал/шум и эффективность. Первое показывает, насколько хорошо выявлен сигнал по сравнению с фоном, и составило 0,855, а второе отражает количество лямбд, составляющих окончательный сигнал, по сравнению с общим количеством лямбд, формирующихся в нашем процессе, и составило 3,3%.

На рис. 2 представлены массовые распределения пар положительного и отрицательного пи-мезона. Наблюдается пик от нейтральных каонов, который был фитирован и извлечены масса (0,497 ГэВ) и ширина (4 МэВ), хорошо согласующиеся с теорией. Также были вычислены соотношение сигнал/шум и эффективность, которые составили 0,686 и 0,69%.

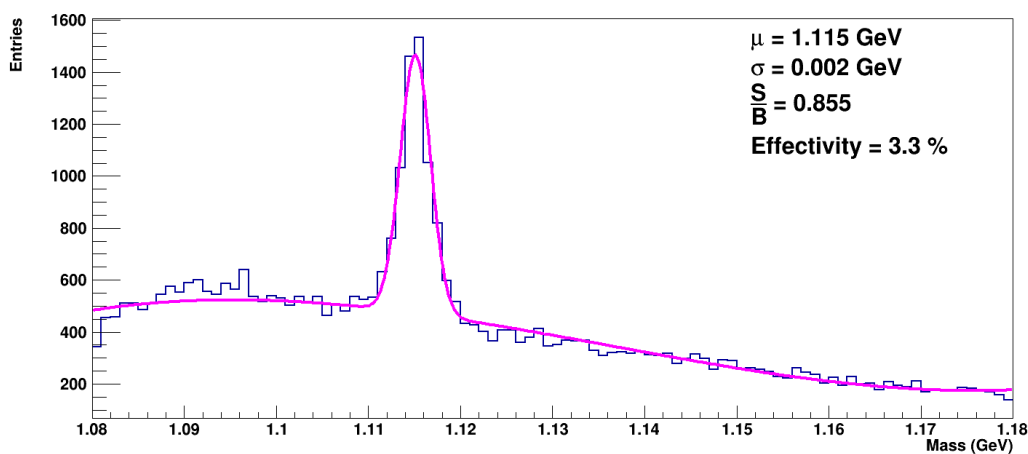


Рис. 1. Распределение по инвариантной массе пар протон–отрицательный пи-мезон. Фиолетовым цветом показана аппроксимация пика лямбда-гиперонов и фона суммой гауссовой функции и полиномом 5-го порядка

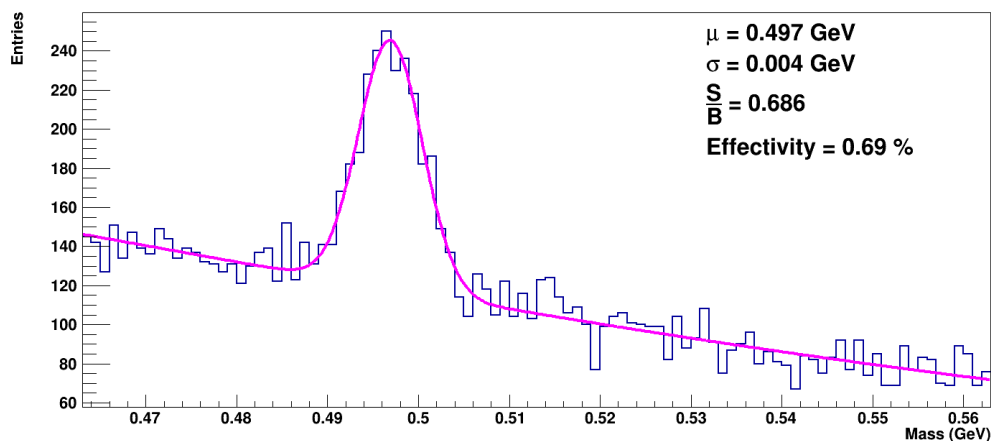


Рис. 2. Распределение по инвариантной массе пар положительный–отрицательный пи-мезон. Фиолетовым цветом показана аппроксимация пика каонов и фона суммой гауссовой функции и полиномом 5-го порядка

### Литература

1. *Kapishin M.* Studies of baryonic matter at the BM@N experiment (JINR) // Nucl. Phys. A. 2019. V. 982. P. 967–970.
2. *Gornaya J.* [et al.]. Hyperons at the BM@N experiment: first results // EPJ Web of Conferences. 2019. 204(2): 01006. DOI:10.1051/epjconf/201920401006
3. *Baznat M.* [et al.]. Monte-Carlo generator of heavy ion collisions DCM-SMM // Phys. Part. Nucl. Lett. 2020. V. 17(3). P. 303–324.

## Аналитическое описание формы гидравлического прыжка

А. Д. Сухов<sup>1,2</sup>, А. Г. Петров<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН

Рассмотрена задача описания гидравлического прыжка, т. е. стационарного течения жидкости со свободной поверхностью в виде функции  $h(x)$  и двумя горизонтальными асимптотами:  $h(+\infty) = h_2$  и  $h(-\infty) = h_1$ , где  $h_1 < h_2$ . Для описания явления используется приближение Бусинеска [1, 2], а также используется подход, схожий с работой Рихарда и Гаврилюка [3], в которой вводится дополнительная сила трения, тормозящая поток жидкости, чтобы уравнять энергетический баланс в системе. Отличие подхода заключается в том, что подбирается сила, выраженная только через высоту прыжка, в отсутствие скорости, при этом задача в таком случае решается аналитически без применения сложных численных схем. При помощи данной методики определяются поверхность прыжка и действующая сила в зависимости от координаты распространения волны. Также произведено сравнение расчетов по данной методике с уже имеющимися моделями и экспериментами для разных соотношений высот низшего и высшего уровней прыжка.

Прыжок можно попытаться описать, дополнив уравнение Бусинеска силой  $f$ . Данная сила имеет физический смысл вихревых сопротивлений на свободной границе гидравлического прыжка и на дне.

$$Q = hu, \quad hu \frac{du}{dx} = -\frac{dP}{dx} - f, \quad P = \frac{gh^2}{2} + \frac{\dot{h}h^2}{3}. \quad (1)$$

Такой же подход применен в работе Гаврилюка [3], в которой сила берется пропорциональной квадрату скорости. В этом случае уже проинтегрировать аналитически систему уравнений не удастся, и она исследуется только численно. Мы же подберем силу, задав ее потенциал  $G$  так, чтобы сила не меняла полный импульс в системе, т. е. должны выполняться законы сохранения. Покажем, что сила, определяемая по формуле

$$f = -\frac{dG}{dx}, \quad G = \frac{Q^2}{h_1 h_2} \left( h^2 \left( \frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2} \right) - \frac{h^3}{h_1 h_2} \right) - \frac{gh^2}{2} \quad (2)$$

с расходом  $Q^2 = gh_1 h_2 (h_1 + h_2)/2$ , не меняет импульс системы.

Отсюда можем получить производную высоты в новой системе уравнений:

$$\left( \frac{dh}{dx} \right)^2 = 3 \left( 1 - \frac{h}{h_2} \right)^2 \left( 1 - \frac{h}{h_1} \right)^2. \quad (3)$$

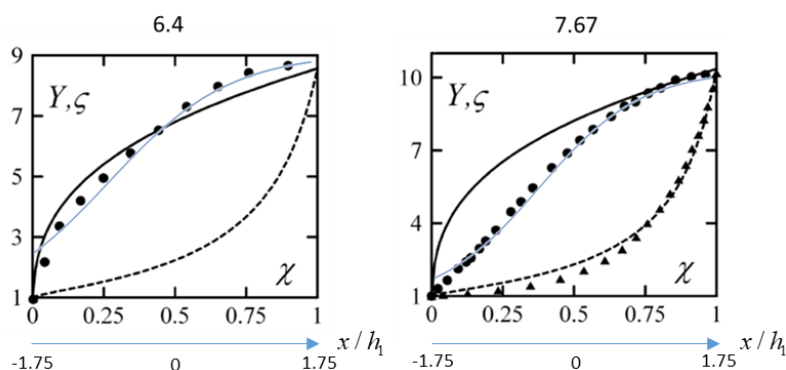


Рис. 1. Сравнение профиля прыжка с экспериментом и другой современной аналитической моделью с разными начальными числами Фруда (слева 6.4 и 7.67 справа). Черные точки — эксперимент [4], черная линия — аналитическая модель [5], черные треугольники — эксперимент (отделены точки безвихревой зоны) [4], черная пунктирная линия — аналитическая модель [5], синяя линия — наша модель

Таким образом, мы можем описывать профиль гидравлического прыжка (рис. 1), зная соотношения высот на бесконечностях, а само соотношение высот хорошо предсказывается, исходя из соотношения Беланджера [6]. Работа выполнена при поддержке РНФ, проект 22-21-00833.



## Литература

1. Benjamin T. B., Lighthill M. J. On cnoidal waves and bores // Proc. R. Soc. London, Ser. A. 1954. V. 224. № 1159. С. 448–460.
2. Петров А. Г. Интегрирование уравнений Бусинеска для стационарных течений в каналах и струях // МЖГ. 2007. № 6. С. 127–139.
3. Richard G. L., Gavriluk S. L. The classical hydraulic jump in a model of shear shallow-water flows // J. Fluid Mech. 2013. V. 725. P. 492–521.
4. Wóycicki K. Wassersprung, Deckwalze und Ausfluss unter einer Schütze: Diss. ETH. Zurich, 1931.
5. Castro-Orgaz O., Hager W. H. Classical hydraulic jump: Basic flow features // J. Hydraul. Res. 2009. V. 47(6). P. 744–754.
6. Belanger J. B. Essai Sur La Solution Numerique De Quelques Problemes: Relatifs Au Mouvement Permanent Des Eaux Courantes (1828) (French Edition) [Facsimile reprint of the original]. — Whitefish, USA: Kessinger Publishing, 2010.

УДК 621.3.09:533.6.01

### Расчетные методы восполнения недостающих данных о стратегических вооружениях США

А. В. Кубышкин<sup>1,2</sup>, И. Н. Белоконь<sup>2</sup>, В. Г. Худовердов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова

Анализ возможностей противостоящих сторон в условиях сокрытия ими основных характеристик своего перспективного вооружения, а также оценка путей противодействия представляют собой важные и сложные задачи. Тем не менее освоение принципиальных подходов к их решению вполне доступно студентам младших курсов, расширяет их кругозор и является уместным для закрепления образа мышления, вырабатываемого в общем курсе физики МФТИ. На кафедральном спецкурсе «Физико-технические основы стратегической стабильности» [1] студенты знакомятся с элементами теории полета баллистических ракет, гиперзвуковых летательных аппаратов, противоракет систем ПРО, базовыми принципами радиолокации, а также основами физики высоких плотностей энергии [2–6]. В рамках концепции «проектирования за противника» организована исследовательская деятельность по баллистическому моделированию, многофакторному радиолокационному и оптическому распознаванию, оценке поражающего действия ядерного взрыва и оружия на новых физических принципах, а также по другим актуальным проблемам в области обороны и безопасности.

Примеры исследуемых зависимостей, по которым оцениваются основные характеристики перспективных стратегических вооружений США, представлены на рис. 1–3. Это, прежде всего, кинематика перспективной межконтинентальной ракеты LGM-35A «Сентинел» фирмы «Нортроп Грумман» (на ранних этапах разработки известна как GBSD — Ground Based Strategic Deterrent), экспериментальных гиперзвуковых летательных аппаратов планирующего типа НТВ (Hypersonic Test Vehicle) фирмы «Боинг», а также возможности радиолокационных станций фирмы «Рейтеон».

Представленные результаты баллистических расчетов студентов свидетельствуют о том, что гиперзвуковой планирующий полет в атмосфере не оптимален энергетически, требует больших, по сравнению с пассивными траекториями, времен доставки полезной нагрузки, но позволяет скрыть движение боеголовок от радиолокационных станций системы ПРО, а также обойти районы перехвата с неожиданных для противника ракурсов. С точки зрения обеспечения стратегической стабильности разработка указанных средств целесообразна в дополнение, но не вместо существующих неуправляемых боеголовок МБР. Кроме очевидной дороговизны и необходимости решения многочисленных технических проблем, массогабаритные характеристики подобных изделий позволяют размещать на одной тяжелой ракете лишь один такой аппарат вместо большого количества традиционных боеголовок. Кроме того, в силу высокой светимости на всем участке скольжения в атмосфере гиперзвуковые летательные аппараты хорошо видны космическим оптико-электронным средствам оптического диапазона. Поэтому развитие космического эшелона ПРО наряду с совершенствованием глобальной сетцентрической структуры передачи целеуказаний может нивелировать преимущества этих аппаратов.

В области радиолокации для стратегической ПРО на современном этапе в США осуществляется переход с арсенид-галлиевой на нитрид-галлиевую элементную базу [7]. В этой связи результаты расчетов, подобных представленным на рис. 3, позволяют ожидать существенного повышения энергетического

потенциала крупноапертурных радаров, увеличение секторов электронного сканирования фазированных антенных решеток и чувствительности приемных элементов. Это, наряду с комплексной обработкой разнотипных данных, получаемых от разноместных радиолокационных и оптических датчиков, может позволить селективировать боеголовки на фоне некоторых элементов сложных баллистических целей на реалистичных для перехвата дальностях. Ряд отечественных и зарубежных экспертов [2, 7–10] сходятся во мнении, что принципиальная возможность многофакторной дискриминации всех элементов сложной баллистической цели путем объединения данных означает военно-технический прорыв, серьезно подрывающий стратегическую стабильность в мире. В силу этого проводимые кафедрой исследования востребованы в профильных организациях оборонно-промышленного комплекса.

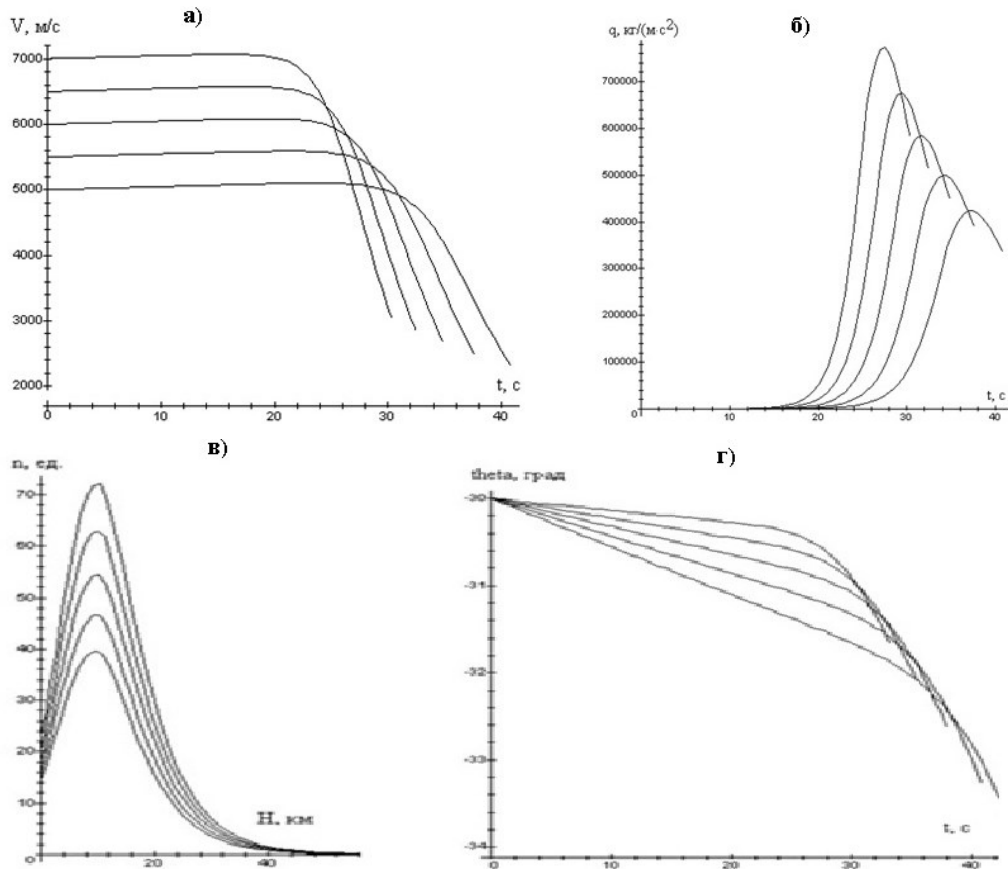


Рис. 1. Оценки кинематических характеристик американских боеголовок Mk21 перспективной ракеты LGM-35A «Сентинел» при входе в плотные слои атмосферы:  $a$  — скорость;  $b$  — скоростной напор;  $в$  — перегрузка;  $г$  — угол входа в атмосферу (угол вектора скорости по отношению к горизонтали); приведены результаты расчетов студентов МФТИ по авторским методикам [1]

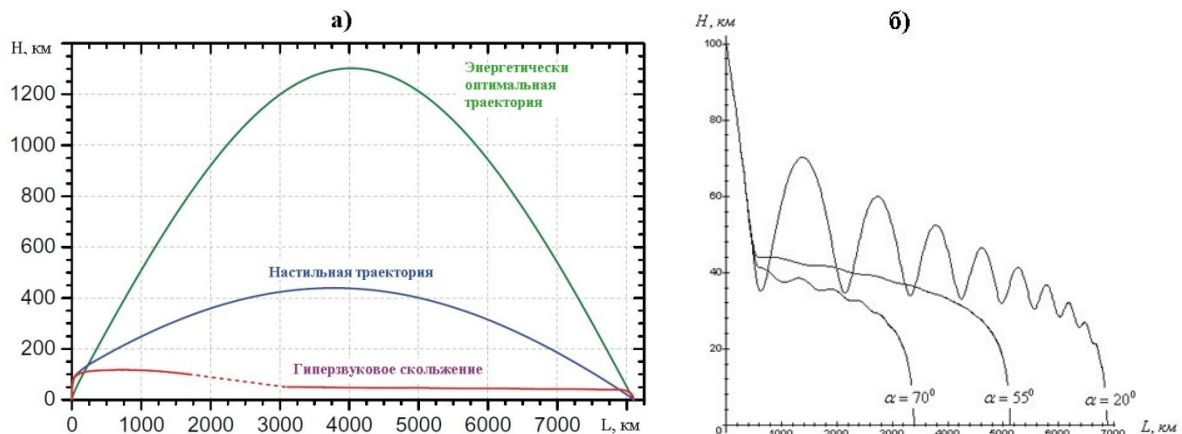


Рис. 2. Сравнение типовых траекторий баллистических ракет ( $a$ ) и гиперзвукового летательного аппарата типа NTV-2 ( $б$ ), американские оценки [7] и результаты расчетов студентов МФТИ по авторским методикам [1] при варьировании угла бросания  $\alpha$

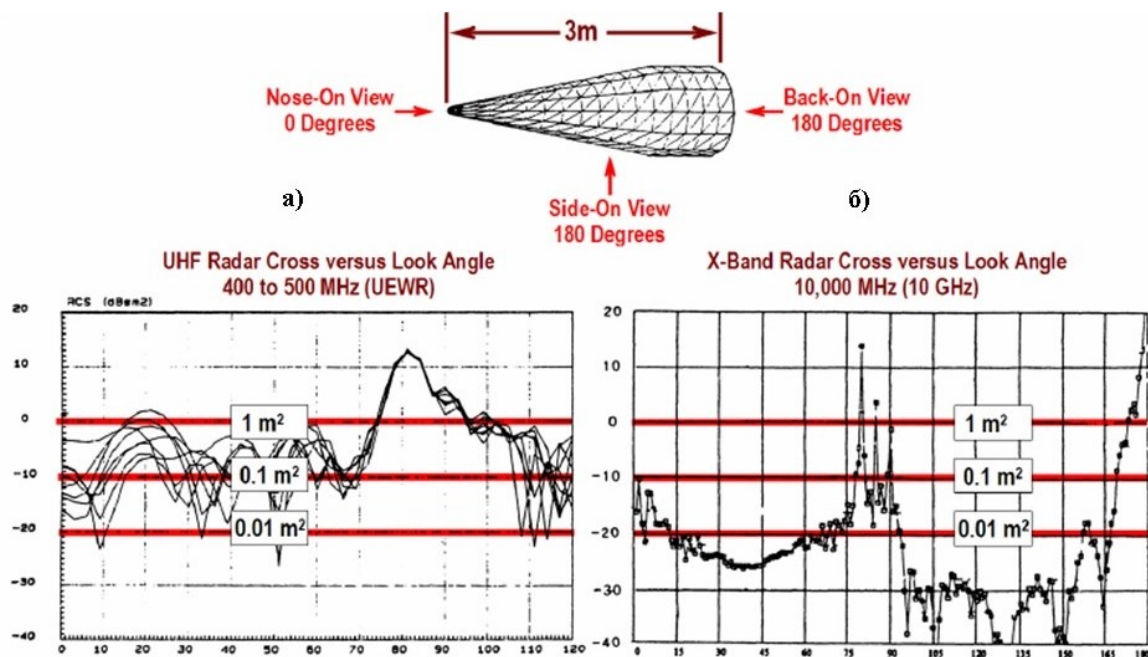


Рис. 3. Радиолокационные характеристики боеголовки ракеты в 30-сантиметровом (а) и 3-сантиметровом (б) диапазонах [11]

В целом следует отметить, что рассматриваемые вопросы традиционно лежат в основе курсов по выбору не только в МФТИ, но и в аналогичных зарубежных учебных заведениях (см., например, [5–11]). Это, прежде всего, близкие Физтеху по модели обучения Массачусетский и Калифорнийский технологические институты, прикладные лаборатории университетов штатов Юта, Техас, Мэриленд и других, Высшая политехническая школа Франции, а также классические физические департаменты Оксфорда и Кембриджа. Данная предметная область достаточно наукоемка, практически значима и устойчива к изменениям международной обстановки. Поэтому участие студентов в общефизических исследованиях проблем стратегической стабильности представляется важной базовой образовательной задачей не только текущего момента, но и всей обозримой перспективы.

### Литература

1. *Кубышкин А. В.* Физико-технические основы стратегической стабильности. Часть 1. Механика: учебно-методич. пособие. — М.: МФТИ, 2022.
2. *Ненартович Н. Э., Горевич Б. Н.* BMDS — система противоракетной обороны США. Анализ и моделирование. — М.: НПО Алмаз, 2020.
3. *Фортвов В. Е.* Физика высоких плотностей энергии. — М.: Физматлит, 2013.
4. *Горелик А. Л.* Селекция и распознавание на основе локационной информации. — М.: Радио и связь, 1990.
5. *Robert M. O'Donnell.* Introduction to Radar Systems. — Lexington: MIT Lincoln Laboratory, 2020.
6. *Baumann R., Kruckmeyer K.* Radiation Handbook for Electronics. — Dallas: University of Texas, 2019.
7. *Tracy C. L., Wright D.* Modeling the performance of hypersonic boost-glide missiles // Science and Global Security. 2020. V. 28(3). P. 135–170.
8. *Goodby J. E., Postol T. A.* A new boost-phase missile defense system—and its diplomatic uses in the North Korea dispute // Bull. At. Sci. 2018. V. 74(4). P. 210–219.
9. *Barton D. K.* [et al.]. Report of the American Physical Society Study Group on boost-phase intercept systems for national missile defense: Scientific and technical issues // Rev. Mod. Phys. 2004. V. 76(3). P. S1–S424.
10. *Sessler A. M.* [et al.]. Countermeasures: A technical evaluation of the operational effectiveness of the planned us national missile defense system. — Cambridge: Massachusetts Institute of Technology, 2000.
11. *Fehlner L. F.* Improved data for the classical determination of radar detection range // Applied Physics Laboratory Technical Digest. — Baltimore: John Hopkins University, 1963. P. 17–24.

## Наведенное поглощение лазерного излучения наносекундной длительности в области полосы поглощения порфирина цинка

А. Э. Калмыков<sup>1</sup>, Л. М. Колдунов<sup>1,2</sup>, М. Ф. Колдунов<sup>2</sup>, А. А. Корнева<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Физтех-лицей им. П. Л. Капицы

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Исследование наведенного поглощения органических соединений имеет как фундаментальный, так и практический интерес, в частности для создания эффективных ограничителей мощности лазерного излучения. Среди соединений, проявляющих наведенное поглощение, наиболее подробно исследованы соединения фталоцианинового ряда. Представленные в литературе результаты [1, 2] касаются наведенного поглощения в области узкого диапазона длин волн при различных длительностях лазерных импульсов. Исследования в широкой области длин волн практически не проводились. Кроме того, подавляющее большинство исследований проводилось на жидких растворах, хотя с практической точки зрения представляет интерес твердотельная матрица.

В данной работе представлены результаты исследования наведенного поглощения порфирина цинка, введенного в композитную матрицу нанопористое стекло–полимер [3] в широкой области длин волн от 500 до 600 нм. В качестве источника излучения использовался перестраиваемый оптический параметрический генератор LS-2145-ОРОНЕ с наносекундной длительностью лазерного импульса. При исследовании выполнялось изучение кривой затемнения по методике, изложенной в работе [4]. Обнаружено, что одно и то же соединение проявляет в различных областях спектра поглощения как просветление, так и наведенное поглощение. Насколько нам известно, такое явление до сих пор не отмечалось в литературе. Конкретно: порфирин цинка просветляется в области 550÷570 нм, тогда как в областях 500÷550 нм и 570÷600 нм наблюдается затемнение.

### Литература

1. Perry J. W., Mansour K., Marder S. R., Perry K. J., Alvarez Jr. D., Choong I. Enhanced reverse saturable absorption and optical limiting in heavy-atom-substituted phthalocyanines // Opt. Lett. 1994. V. 19. P. 625–627.
2. Koldunov M. F., Koldunov L. M. Two-parametric scaling law and figures of merit of excited-state absorption of organic dyes // Opt. Commun. 2017. V. 385. P. 199–204.
3. Koldunov M. F., Manenkov A. A. Dye doped polymer-filled nanoporous glass — a new class of materials for laser optics // Advances in composite materials for medicine and nanotechnology. — London: IntechOpen, 2011. Ch. 19. P. 507–534.
4. Долотов С. М., Колдунов Л. М. [и др.] Нелинейное поглощение лазерного излучения фталоцианинами цинка и свинца и порфирином цинка, в композитной матрице нанопористое стекло-полимер // Квантовая электроника. 2012. Т. 42. № 1. С. 39–43.

---

# Секция теоретической физики

---

Председатель: Э. Т. Ахмедов (д. ф.-м. н., зав. кафедрой)

Зам. председателя: М. Г. Иванов (к. ф.-м. н., доцент)

Секретарь: И. В. Черноусов (к. ф.-м. н.)

---

Дата: 05.04.2023

Время: 11:00

УДК 539.1.01

## Рождение пентакварков в слабых распадах прелестных барионов

*М. М. Вороненко*

Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова

Адроны — это частицы, содержащие в своем составе кварки и глюоны, которые участвуют в сильном, слабом и электромагнитном взаимодействии. Обычные адроны, состоящие из кварков и антикварков, делятся на две основные группы: мезоны — связанные состояния кварка и антикварка — и барионы — трехкварковые состояния. Теория также допускает существование других экзотических адронов [1], таких как тетракварки, состоящие из двух кварков и двух антикварков, и пентакварки, отличающиеся от обычных барионов дополнительной кварк-антикварковой парой в составе. Помимо статистических свойств, определяемых спином, у адронов существуют дополнительные квантовые числа, обусловленные ароматами кварков. Как хорошо известно [2], только пять кварков из шести могут образовывать связанные состояния, причем наиболее тяжелые из них — прелестные адроны — должны содержать хотя бы один  $b$ -кварк. Что касается экзотических адронов, то на данный момент экспериментально выявлено достаточно большое число тетракварков и пентакварков со скрытым чармом, т. е. частиц, содержащих в своем составе пару из очарованных кварка и антикварка [2]. Следует отметить, что пентакварки со скрытым очарованием были открыты в распадах  $\Lambda_b$ -бариона, самого легкого и наиболее изученного экспериментально из прелестных барионов, на протон и  $J/\psi$ - и  $K$ -мезоны за счет слабых взаимодействий [3, 4]. В аналогичном распаде  $\Xi_b$ -бариона на  $\Lambda$ -гиперон и  $J/\psi$ - и  $K$ -мезоны имеется указание на существование странного пентакварка со скрытым очарованием [5]. В данной работе исследуются слабые распады прелестных барионов на пентакварки со скрытым чармом и легкие мезоны, обусловленные  $SU(3)_F$ -симметрией легких кварков.

Ароматовая  $SU(3)_F$ -симметрия допускает существование большого числа пентакварковых состояний со скрытым очарованием, различающихся составом легких кварков. Многочисленные адроны могут быть объединены в мультиплеты по группе  $SU(3)_F$ . Поскольку пара очарованных кварка и антикварка образуют синглет по группе  $SU(3)_F$ , то пентакварки со скрытым чармом объединяются в октет и декуплет, в полной аналогии с обычными барионами [6]. Очарованные барионы образуют триплет и секстет по этой группе. С учетом классификации эффективного четырехфермионного гамильтониана слабых взаимодействий по представлениям ароматовой группы, можно найти вероятность распада всех очарованных барионов из выбранного мультиплета на пентакварк и легкий мезон из мультиплетов конечных частиц. Зная вероятность хотя бы одного распада, можно найти вероятности других распадов для частиц, входящих в соответствующие мультиплеты с барионом, пентакварком и мезоном.

Используя ароматовую симметрию легких кварков, вычислены амплитуды распадов прелестных барионов, принадлежащих как триплетному, так и секстетному представлениям  $SU(3)_F$ -группы. Полученные амплитуды выражены через универсальные амплитуды, характеризующие вклады от допустимых фейнмановских диаграмм. Из-за симметрии тяжелого кварка диаграмма, в которой легкий дикварк из прелестного бариона переходит напрямую в пентакварк, будет давать наибольший вклад в полную амплитуду распада [7]. Учитывая эту симметрию, были получены относительные вероятности распадов прелестных барионов и выявлены наиболее привлекательные для экспериментального обнаружения новых пентакварков каналы.

## Литература

1. *Gell-Mann M. A.* Schematic model of baryons and mesons // Phys. Lett. 1964. V. 8. P. 214–215.
2. *Workman R. L.* [et al., Particle Data Group]. Review of particle physics // PTEP. 2022. V. 2022: 083C01.
3. *Aaij R.* [et al., LHCb Collab.]. Observation of  $J/\psi$  p resonances consistent with pentaquark states in  $\Lambda_b^0 \rightarrow J/\psi K^- p$  decays // Phys. Rev. Lett. 2015. V. 115: 072001.
4. *Aaij R.* [et al., LHCb Collab.]. Observation of a narrow pentaquark state,  $P_c(4312)^+$ , and of two-peak structure of the  $P_c(4450)^+$  // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122. P. 222001.
5. *Aaij R.* [et al., LHCb Collab.]. Evidence of a  $J/\psi \Lambda$  structure and observation of excited  $\Xi^-$  states in the  $\Xi^- \rightarrow J/\psi \Lambda K^-$  decay // Sci. Bull. 2021. V. 66. P. 1278–1287.
6. *Ожунь Л. Б.* Лептоны и кварки. — М.: Наука, 1982.
7. *Ali A., Ahmed I., Aslam M. J., Rehman A.* Heavy quark symmetry and weak decays of the b-baryons in pentaquarks with a c c-bar component // Phys. Rev. D. 2016. V. 94: 054001.

УДК 530.145.81

## Перенормировки сумм и интегралов в цифровом представлении

*М. Г. Иванов, А. Ю. Полушкин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

При рассмотрении цифровых представлений непрерывных квантовых наблюдаемых в работах [1–3] возникла необходимость в перенормировке некоторых сумм и интегралов. В данной работе детально рассматриваются мотивация, возникновение и проведение подобных перенормировок как на прямой, так и на решетке.

Рассмотрим некоторую систему с основанием  $q$  и цифрами  $\{0, 1, \dots, q\}$ . Для нее степенной ряд

$$\sum_{s=-\infty}^{\infty} c(s, x) q^s, \quad (1)$$

где  $c(s, x)$  — цифра координаты номер  $s$ , вообще говоря, не обязан сходиться. Можно ввести «сумму со штрихом», для которой формальное равенство

$$\sum_{s=0}^{\infty'} q^s = \frac{1}{1-q}, \quad (2)$$

Соответствующее применению формулы для сходящейся геометрической прогрессии за пределами ее области применимости. Такая перенормировка приводит нас к выражению

$$\sum_{s \in \mathbb{Z}}' q^s = 0, \quad (3)$$

которое, вообще говоря, можно считать альтернативным определением перенормировки (2). Также можно рассмотреть этот ряд в  $q$ -адическом смысле, однако в таком случае мы потеряем сходимость чисел с бесконечным числом нулевых цифр после  $q$ -ричной запятой, получив при этом сходимость чисел с бесконечным числом ненулевых цифр до запятой.

Проведем формальное вычисление:

$$x = \frac{qx - x}{q - 1} = \frac{1}{q - 1} \sum_{s \in \mathbb{Z}}' (c(s - 1, x) - c(s, x)) q^s. \quad (4)$$

Рассмотрим на простом примере, почему подобные перенормировки возникают и какую роль они играют на прямой. Положим  $q = 2$  и рассмотрим график двоичной цифры в системе с цифрами  $\{0, 1\}$ .

Можно видеть, что для отрицательных чисел мы в подобной системе будем иметь расходящийся ряд. Действительно, все «старшие» цифры для отрицательного числа в этой системе оказываются равными единице и дают бесконечный вклад в ее двоичное разложение. При этом перенормировка вида

$$x = 2x - x = \frac{1}{2} \sum_{s \in \mathbb{Z}}' (c(s - 1, x) - c(s, x)) 2^s \quad (5)$$

решает проблему с расходимостью подобного ряда, ведь если все «старшие» цифры, начиная с некоторого  $n$ , оказываются равны единице, то  $c(s-1, x) - c(s, x) = 0 \forall s > n$ .

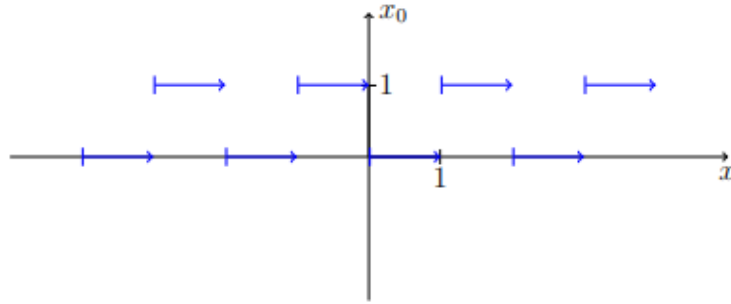


Рис. 1. График значения цифры перед двоичной запятой (множитель перед  $2^0$ ) для двоичной системы с цифрами  $\{0,1\}$

Метод перенормировки может быть обобщен с прямой на случай, когда координаты и импульсы ограничены решеткой. Рассмотрим решетку  $\Delta x \cdot Z_N$ . У нее нет бесконечно удаленных узлов, поэтому на решетке перенормировка призвана не к приписыванию конечных значений расходящимся рядам, а к перемене представления  $Z_N$  с  $\{0,1, \dots, N-1\}$  на  $\{-k, -k+1, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, N-k-1\}$ .

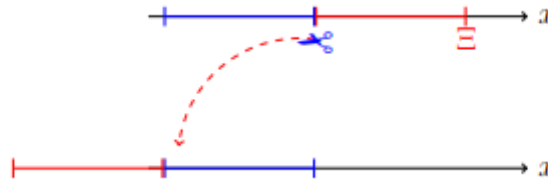


Рис. 2. Перенормировка на решетке «переносит» последние узлы решетки в начало

На прямой иногда (например, при изменении масштаба единичного интервала) может оказаться удобным перейти к «нецелым» значениям номера цифры, которые могут быть определены как

$$c(s, x) = c(0, q^{-s}x) = C(q^{-s}x). \quad (6)$$

По аналогии с рядом можно рассмотреть формальный интеграл:

$$x \sim \int_{-\infty}^{\infty} c(s, x) q^s ds. \quad (7)$$

Аналогично сумме такой интеграл до введения перенормировки не обязан сходиться. Процедура возникновения перенормировки аналогична той, что была рассмотрена для суммы; определим

$$\int_{-\infty}^{\infty'} q^s ds = 0. \quad (8)$$

По аналогии с суммой можем записать для  $x$  общую формулу:

$$x = \frac{1}{q-1} \int_{-\infty}^{\infty} [c(s-1, x) - c(s, x)] q^s ds. \quad (9)$$

### Литература

1. *Иванов М. Г.* Двоичное представление координаты и импульса в квантовой механике // Теоретическая и математическая физика. 2018. Т. 196(1). С. 70–87.
2. *Ivanov M. G., Polushkin A. Yu.* Ternary and binary representation of coordinate and momentum in quantum mechanics // AIP Conference Proceedings. V. 2362(1): 040002.
3. *Ivanov M. G., Polushkin A. Yu.* Digital representation of continuous observables in quantum mechanics // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2301.09348.

## Деформации решений супергравитации компактными изометриями

Т. А. Петров<sup>1</sup>, Э. Т. Мусаев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Казанский федеральный университет

В современной теоретической физике важное место занимает как поиск новых теорий, так и поиск решений уравнений движения уже существующих теорий. Частью этой деятельности является исследование уравнений супергравитации на предмет новых решений. Одним из известных методов этого поиска является деформация уже существующих решений. Суть этого метода заключается в том, что с помощью нелинейного преобразования полей супергравитации можно получить новое решение [4]. Это преобразование строится на основе внутренних симметрий супергравитации и задается некоторым набором параметров, записываемых как тензоры различных рангов [5, 7]. Из-за технической сложности построения данного преобразования в основном оно исследуется с набором параметров, описываемым би- и три-векторами.

Важно отметить, что эти тензоры за счет геометрических свойств решений супергравитации не произвольны. На них требуется накладывать условия, которые описываются классом уравнений, называемых уравнениями Янга–Бакстера. В общем случае — это система полиномиальных уравнений на параметрический тензор, определенный на алгебре Ли. В качестве ее коэффициентов выступают структурные константы, в нашей задаче алгебры изометрий деформируемого решения. В случае бивекторной деформации эта система уравнений называется классическим уравнением Янга–Бакстера [1, 3]. Свойства решений этого уравнения хорошо исследованы, и среди них есть теорема, утверждающая, что в случае, если алгебра изометрий деформируемого решения компактна, то все решения натянуты на абелеву подалгебру [6]. Естественно, это сводит к минимуму число возможных параметризуемых бивекторами деформаций решений с компактным фоном. Это также ограничивает возможные применения метода деформаций к смежным областям, к примеру, в голографической дуальности [2].

Как известно, она связывает решения супергравитации и калибровочные теории, и метод деформации решений позволяет проецировать новые решения супергравитации в новые калибровочные теории. Показано, что последние, если деформация строилась на некомпактных изометриях, будут определены на геометрически очень сложном многообразии, с некоммутативными координатами. Другое дело, если деформация строилась на компактных изометриях, там деформация сводится к прибавлению к изначальной калибровочной теории маргинальных операторов. Подобная простота делает деформации на компактных фонах предпочтительней некомпактных, тем самым увеличивая их важность [8].

Длительное время считалось, что подобное свойство бивекторных деформаций распространяется и на тривекторные. На тривекторные параметры деформаций, в отличие от классического уравнения Янга–Бакстера, в случае бивекторных накладывается так называемое обобщенное уравнение Янга–Бакстера. В нашей научной группе было высказано сомнение в данном свойстве тривекторных деформаций, и нами было проведено его тщательное исследование. В его ходе были получены отличные от общепринятых результаты — был найден пример его решений на компактном фоне с тривекторами, натянутыми на неабелеву подалгебру. Также были построены примеры деформаций некоторых простых решений 11-мерной супергравитации для двух ее компактных и некомпактных решений. Их наличие дает надежду на более широкую область применимости метода деформаций.

### Литература

1. *Belavin A. A., Drinfeld V. G.* Solutions of the classical Yang–Baxter equation for simple Lie algebras // *Funct. Anal. Appl.* 1982. V. 16(3). P. 159–180.
2. *Ashmore A., Petrini M., Tasker E. L., Waldram D.* Exactly marginal deformations and their supergravity duals // *Phys. Rev. Lett.* 2022. V. 128(19): 191601.
3. *Malek E., Sakatani Y., Thompson D. C.* E6(6) exceptional Drinfel'd algebras // *JHEP.* 2021. V. 2021(1): 020.
4. *Bakhmatov I., Çatal Özer A., Deger N.S., Gubarev K., Musaev E. T.* Generalizing eleven-dimensional supergravity // *Phys. Rev. D.* 2022. V. 105(8): L081904.
5. *Bakhmatov I., Gubarev K., Musaev E. T.* Non-abelian tri-vector deformations in  $d=11$  supergravity // *JHEP.* 2020. V. 2020(05): 113.
6. *Pop I., Stolin A.* Rational solutions of CYBE for simple compact real Lie algebras // *J. Geom. Phys.* 2007. V. 57(5). P. 1379–1390.



7. Gubarev K., Musaev E. T. Polyvector deformations in eleven-dimensional supergravity // Phys. Rev. D. 2021. V. 103(6):066021.
8. Leigh R. G., Strassler M. J. Exactly marginal operators and duality in four-dimensional  $N=1$  supersymmetric gauge theory // Nucl. Phys. B. 1995. V. 447. P. 95–136.

УДК 539.1.01

## Симметрия «тяги-крюк» квантовых $bj$ -символов

*Е. Н. Ланина<sup>1,2</sup>, А. В. Слепцов<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Курчатовский комплекс теоретической и экспериментальной физики НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>Институт проблем передачи информации

Коэффициенты Рака, или  $bj$ -символы, задают изоморфизм между двумя различными слияниями (двумя естественными базисами) в тензорном произведении трех представлений. Коэффициенты Рака являются распространенными объектами в теоретической и математической физике в связи с разложением тензорных произведений представлений. Для эффективного решения подобных задач необходимо глубоко понимать внутреннюю структуру коэффициентов Рака и их аналитическую зависимость от параметров.

Коэффициенты Рака возникают уже в задаче сложения трех угловых моментов в квантовой механике. Они являются элементами матрицы перехода между двумя базисами, соответствующими разному порядку сложения моментов. Существует огромный список физических применений  $bj$ -символов: они фигурируют в описании эффекта Ландау–Померанчука–Мигдала в кварк-глюонной плазме [1], в задачах ядерной спектроскопии [2], в решеточной калибровочной теории [3], в задачах, связанных с квантовыми состояниями ультрахолодных атомов щелочноземельных металлов [4], в теории полупроводников для построения кубитов [5]. Более близкими к нашей теме примерами являются преобразования конформных блоков [6] и вычисление наблюдаемых в теории Черна–Саймонса методом Решетихина–Тураева [7].

Коэффициенты Рака хорошо определены для конечномерных и некоторых бесконечномерных представлений классических групп Ли, а также для представлений их обобщений — квантовых групп. В последнем случае коэффициенты Рака называются квантовыми. В нашей работе мы рассматриваем только неприводимые конечномерные представления квантовой универсальной обертывающей  $U_q(sl_N)$ .

Симметрии квантовых  $bj$ -символов полностью описаны только для случая  $sl_2$ . Соответствующая группа симметрии  $S_4 \times S_3$ , где в контексте квантовых  $bj$ -символов  $S_4$  называют симметрией тетраэдра, а  $S_3$  обозначает симметрию Редже. Для  $sl_N$ ,  $N > 2$ , полная группа симметрии неизвестна. В работе [8] обсужден способ построения новых симметрий с использованием гипотезы о собственных значениях, но явно симметрии были получены только для случаев симметрических и сопряженных им представлений. Мы ввели симметрию «тяги-крюк», которая сохраняет коэффициенты Рака. Это первая обнаруженная симметрия матриц Рака, которая верна вне случаев без вырождений.

Введем преобразование «тяги-крюк» в терминах диаграмм Юнга. Диаграмма Юнга помещается внутрь подходящего толстого крюка  $(K + M|M)$  для некоторых целых чисел  $K$  и  $M$ . Введем следующие обозначения: первые  $K$  строк параметризуем их длиной  $R_i$ ,  $i = 1, \dots, K$ , остальные строки параметризуем переменными  $\alpha_i = R_i - (i - K) + 1$ ,  $\beta_i = R'_{i-K} - i + 1$ ,  $i = K + 1, \dots, K + M$ , где штрих обозначает транспонирование диаграммы Юнга. Преобразование «тяги-крюк»  $T_\epsilon^{(K + M|M)}$  преобразует диаграмму Юнга внутри толстого крюка:

$$R_i \rightarrow R_i - \epsilon,$$

$$\alpha_i \rightarrow \alpha_i - \epsilon,$$

$$\beta_i \rightarrow \beta_i + \epsilon,$$

где  $\epsilon$  — соответствующий сдвиг диаграммы.

Собственные значения  $R$ -матриц выражаются через квадратичные инварианты Казимира  $U_q(sl_N)$ , и, как было нами показано при изучении групповой структуры цветных полиномов ХОМФЛИИ [9], они не меняются при преобразовании «тяги-крюк». Гипотеза о собственных значениях утверждает, что матрицы Рака равны в базисах, где  $R$ -матрицы диагональны, если два набора нормированных собственных

значений соответствующих  $R$ -матриц совпадают. Отсюда следует, что и коэффициенты Рака должны быть инвариантны относительно преобразования «тяги-крюк»:

$$U \left[ \begin{array}{cc|c} R_1 & R_2 & R_{12} \\ R_3 & R_{123} & R_{23} \end{array} \right] = U \left[ \begin{array}{cc|c} T_{\epsilon_1}(R_1) & T_{\epsilon_2}(R_2) & T_{\epsilon_1+\epsilon_2}(R_{12}) \\ T_{\epsilon_3}(R_3) & T_{\epsilon_1+\epsilon_2+\epsilon_3}(R_{123}) & T_{\epsilon_2+\epsilon_3}(R_{23}) \end{array} \right].$$

Важно подчеркнуть, что симметрия «тяги-крюк» — это первая найденная симметрия матриц Рака, которая действует на любых представлениях и работает для случаев с кратностями.

Гипотеза о собственных значениях была доказана для  $U_q(sl_2)$  и в случае узлов для  $U_q(sl_N)$  для матриц размером до  $5 \times 5$  без кратностей. Поэтому в этих случаях и симметрия «тяги-крюк» для квантовых  $6j$ -символов является доказанной.

С другой стороны, симметрия «тяги-крюк» для матриц Рака следует из одноименной симметрии цветных полиномов узлов ХОМФЛИ. И наоборот, теперь уже для случая зацеплений полиномы ХОМФЛИ состоят из квантовых размерностей и собственных значений  $R$ -матриц, которые инвариантны относительно преобразования «тяги-крюк». А матрицы Рака оказываются инвариантными относительно этого преобразования согласно гипотезе о собственных значениях. Таким образом, все структурные элементы полинома ХОМФЛИ инвариантны относительно симметрии «тяги-крюк», и мы можем констатировать, что она выполняется и для случая зацеплений — для которого она ранее даже не была сформулирована.

И наконец, в качестве подтверждения наличия симметрии «тяги-крюк» у квантовых  $6j$ -символов мы приводим крайне нетривиальные примеры ее выполнения для случаев представлений с кратностями. А именно, мы рассматриваем случай  $R = [3,2] \rightarrow T_1^{(2|1)}([3,2]) = [3,1]'$ . Среди всех получившихся диаграмм Юнга  $R_{123}$  есть четыре нетривиальные матрицы с кратностями, которые в сумме дают 99  $6j$ -символов:

$$\begin{aligned} V_{[7,5,1,1,1]} &\in V_{[3,2]}^{\otimes 3} \rightarrow V_{[8,2,1,1]}' \in V_{[3,1]}'^{\otimes 3}; \\ V_{[8,5,1,1]} &\in V_{[3,2]}^{\otimes 3} \rightarrow V_{[7,2,1,1,1]}' \in V_{[3,1]}'^{\otimes 3}; \\ V_{[8,6,1]} &\in V_{[3,2]}^{\otimes 3} \rightarrow V_{[6,2,2,1,1]}' \in V_{[3,1]}'^{\otimes 3}; \\ V_{[7,6,1,1]} &\in V_{[3,2]}^{\otimes 3} \rightarrow V_{[7,2,2,1]}' \in V_{[3,1]}'^{\otimes 3}. \end{aligned}$$

Во всех этих случаях существует базис, в котором соответствующие матрицы Рака совпадают. Работа выполнена при поддержке фонда развития теоретической физики и математики «Базис».

### Литература

1. *Arnold P., Landau–Pomeranchuk–Migdal effect in sequential bremsstrahlung: From large- $N$  QCD to  $N=3$  via the  $SU(N)$  analog of Wigner  $6j$  symbols*// Phys. Rev. D. 2019. V. 100: 034030.
2. *Hecht K. T.* A simple class of  $U(N)$  Racah coefficients and their application // Commun. Math. Phys. 1975. V. 41. P. 135–156.
3. *Aroca J. M., Fort H., Gambini R.* Path integral loop representation of 2+1 lattice non-Abelian gauge theories // Phys. Rev. D. 1998. V. 58: 045007.
4. *Gorshkov A. V.* [et al.]. Two-orbital  $SU(N)$  magnetism with ultracold alkaline-earth atoms // Nat. Phys. 2010. V. 6. P. 289–295.
5. *Durst A. C., Yang-Mejia G., Bhatt R. N.* Quadrupolar interactions between acceptor pairs in p-doped semiconductors // Phys. Rev. B. 2020. V. 101: 035202.
6. *Moore G., Seiberg N.* Classical and quantum conformal field theory // Commun. Math. Phys. 1989. V. 123. P. 177–254.
7. *Reshetikhin N. Yu., Turaev V. G.* Ribbon graphs and their invariants derived from quantum groups // Commun. Math. Phys. 1990. V. 127(1). P. 1–26.
8. *Morozov A., Sleptsov A.* New symmetries for the  $U_q(sl_N)$   $6j$ -symbols from the eigenvalue conjecture // JETP Lett. 2018. V. 108. P. 697–704.
9. *Lanina E., Sleptsov A., Tselousov N.* Chern-Simons perturbative series revisited // Phys. Lett. B. 2021. V. 823: 136727.

## Фаза Гинзбурга–Ландау в кристаллических топологических сверхпроводниках

*Е. А. Тепляков<sup>1</sup>, В. Г. Яржемский<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН

Концепция топологического параметра порядка в настоящее время прочно утвердилась в качестве ключевой характеристики систем конденсированного состояния, таких как топологические металлы и нетрадиционные (unconventional) сверхпроводники. В настоящей работе исследуется фаза Гинзбурга–Ландау ( $e^{im\varphi}$ ), следующая из калибровочной инвариантности параметра порядка сверхпроводящего состояния (ППСС), с точки зрения пространственно-группового подхода, основанного на теореме Макки–Брэдли, учитывающего шубниковскую и федоровскую симметрию. Андерсон впервые предложил рассматривать куперовскую пару как двухэлектронное состояние, построенное с учетом принципа Паули [1]. Воловик и Горьков в своей работе [2] обобщили подход Ландау и предложили использовать сферические функции для описания параметра порядка. В пространственно-групповом подходе Яржемского–Муравьева [3] волновая функция куперовской пары принадлежит неприводимому представлению точечной группы, и при конечных вращениях изменение фазы определяется диагональным элементом матрицы неприводимого представления, записанного в виде  $e^{im\Delta\varphi}$ .

Цель данной работы — соединить два подхода к исследованию фазы Гинзбурга–Ландау: новый пространственно-групповой метод и подход Андерсона–Воловика–Горькова. Показано, что для этого надо приравнять топологический угловой момент  $m$  в базисной зоне Бриллюэна и тереоретико-групповой квазимомент  $\bar{m}$ . Для описания различных параметров порядка, принадлежащих одному представлению, вводятся дополнительные квантовые числа и операция обращения времени [4]. Также эти дополнительные квантовые числа определяют топологическую структуру и угловой момент куперовских пар. Теоретические результаты сравниваются с экспериментом для сверхпроводников  $UTe_2$  и  $Sr_2RuO_4$ . Описаны две фазы в  $UTe_2$ , и переход между ними объясняется связыванием одной из проекций триплетного спина ( $M_S=0$  или  $M_S=1$ ) с моментом пары. Результаты пространственно-группового подхода объясняют экспериментально обнаруженные вертикальные нулевые плоскости ППСС хиральной фазы  $Sr_2RuO_4$

### Литература

1. *Anderson P. W.* Structure of “triplet” superconducting energy gap // *Phys. Rev. B.* 1984. V. 30. P. 4000–4002.
2. *Volovik G. E., Gor'kov L. P.* Superconducting classes in heavy-fermion systems // *Sov. Phys. JETP.* 1985. V. 61(4). P. 843–854.
3. *Yarzhemsky V. G., Murav'ev E. N.* Space group approach to the wavefunction of a Cooper pair // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1992. V. 4(13). P. 3525–3532.
4. *Yarzhemsky V. G., Teplyakov E. A.* Additional quantum numbers for two-electron states in solids. Application to topological superconductor  $UPt_3$  // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2021. V. 54(45): 455304.

## Высокотемпературная электронно-дырочная жидкость в монослойных пленках дихалькогенидов переходных металлов

*П. Л. Пех*

Физический институт РАН

Электрон-дырочная жидкость (ЭДЖ), впервые предсказанная Келдышем в 1968 [1], активно изучалась в полупроводниках типа кремния и германия [2]. ЭДЖ представляет собой низкотемпературную плотную фазу, когда экситоны конденсируются в электронно-дырочные капли. Типичная критическая температура очень низка, порядка гелиевых. Но именно монослои дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) из-за двумерности являются идеальной площадкой для наблюдения эффектов сильного взаимодействия между носителями тока. Так, недавно наблюдалась ЭДЖ в монослоях  $MoS_2$  с критической температурой выше комнатной [3].

Рассматривается двумерный полупроводник с числом  $\nu$  эквивалентных электронных и дырочных долин. Под действием излучения в нем образуются неравновесные носители тока с концентрацией  $n$ ; если их время жизни достаточно большое для термализации системы, то ее можно описывать квазиравновесным характеристиками. Полная энергия на одну пару электрон–дырка представляется в виде

$$E(r_s) = E_K + E_X + E_C, \quad (1)$$

где  $E_K = 1/r_s^2$  — средняя кинетическая энергия,  $E_X = 8\sqrt{2}/3\pi r_s$  — обменная энергия и  $E_C$  — корреляционная энергия, расчет которой и представляет собой основную вычислительную сложность. Корреляционная энергия в приближении Нозьера–Пайнса представляется в виде интеграла по передаваемым импульсам  $q$   $E_C = \int_0^\infty I(q) dq$  [4], где эта функция при больших импульсах берется в виде второго порядка теории возмущений

$$I(q > q_2) = -2(4\nu - 1)/q^3. \quad (2)$$

При малых берется разложение RPA возле нулевого импульса

$$I(0 < q < q_1) = -\frac{2\sqrt{2}q}{\pi r_s} + \frac{2^{1/4} q^{3/2}}{r_s^{3/2} \nu^{1/2}} - \frac{(\pi + 2)q^2}{2r_s^2 \nu} + \frac{3q^{5/2}}{2^{13/4} r_s^{5/2} \nu^{3/2}} + \frac{(r_s^2 \nu^2 - 1)q^3}{6\pi\sqrt{2}r_s^3 \nu^2}, \quad (3)$$

а в промежуточной области функции (2) и (3) сшиваются общей прямой касательной,  $r_s = \sqrt{\nu/\pi n}$  — безразмерное расстояние между частицами, энергия в единицах и импульсы в единицах. Основное состояние находится минимизацией функционала (1)  $\partial E/\partial r_s = 0$ .

На рис. 1 показаны результаты расчетов по методу Нозьера–Пайнса для функционала (1) и вычисленные параметры основного состояния в зависимости от числа долин. Как и полагается, с увеличением числа долин энергия ЭДЖ становится больше, а сама фаза уплотняется. Оказывается, что параметры основного состояния хорошо приближаются степенными зависимостями  $|E_{\text{EHL}}| \sim \nu^{+0,613}$ ,  $r_{\text{sEHL}} \sim \nu^{-0,258}$ . Существует более простая степенная формула для корреляционной энергии  $E_C \sim n^{1/3}$  [5], которая является асимптотически точной в пределе большого числа долин, что дает для тех же величин  $|E_{\text{EHL}}| \sim \nu^{1/2}$ ,  $r_{\text{sEHL}} \sim \nu^{-1/4}$ . Видно хорошее согласие для показателя безразмерного расстояния этими двумя разными методами. Однако различие показателей для энергии ЭДЖ можно объяснить тем, что асимптотически точный режим при числе долин  $\nu = 1 - 6$  еще не достигнут.

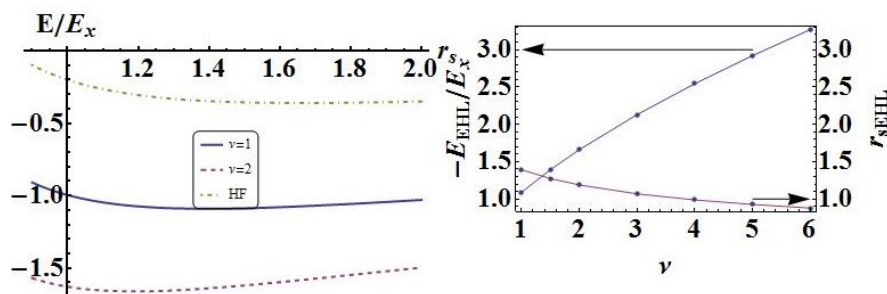


Рис. 1. Слева — энергия системы в зависимости от безразмерного расстояния между частицами для одной и двух долин в приближении Нозьера–Пайнса, а также в приближении Хартри–Фока. Справа — параметры основного состояния ЭДЖ в зависимости от числа долин

## Литература

1. *Keldysh L. V.* Concluding remarks // Proc. of 9th Int. Conf. Phys. Semicond. — Moscow, 1968. P. 1303.
2. *Electron-hole droplets in semiconductors* / Ed. C. D. Jeffreys, L. V. Keldysh. — Netherlands: North-Holland Physics Publishing, 1983.
3. *Yu Y.* [et. al.]. Room-temperature electron-hole liquid in monolayer MoS<sub>2</sub> // ACS Nano. 2019. V. 13: 10351.
4. *Пех П. Л., Ратников П. В., Силин А. П.* Электронно-дырочная жидкость в монослойных гетероструктурах на основе дихалькогенидов переходных металлов // Письма в ЖЭТФ. 2020. Т. 111. С. 80–85.

5. Бабиченко Б. С., Полищук И. Я. Кулоновские корреляции и электронно-дырочная жидкость в двойных квантовых ямах // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 97. С. 726–731.

УДК 533.922

## Петлевые поправки к току скалярных частиц в сильном электрическом пульсе

*П. С. Завгородний, Д. И. Садеков, К. А. Казарновский*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В большинстве оригинальных работ по рождению швингеровских пар в сильных фоновых электрических полях явления рассматривались на древесном уровне. Однако недавние исследования показывают, что ИК-эффекты могут приводить к значительным поправкам на петлевом уровне, поэтому необходимо выполнять пересуммирование всех петель, учитывая кинетические уравнения и т. д. [1, 2]. Чтобы понять, какие вклады в полные корреляционные функции нам нужно учитывать, мы должны изучить, какие петли получают поправки, которые зависят от длительности действия поля. Эти вопросы особенно интересны в пространстве де Ситтера, где суммирование растущих петлевых поправок все еще остается открытым вопросом для некоторых важных ситуаций, таких как легкие скалярные поля, поэтому также важно исследовать аналогичную ситуацию в КЭД с сильным внешним электрическим полем.

В данной работе мы рассматриваем скалярную КЭД на фоне сильного длительного электрического импульса

$$A_{\mu}^{cl} = (\mathbf{0}; A_1(t); \mathbf{0}; \mathbf{0}), A_1(t) = ET \tanh \frac{t}{T}$$

и вычисляем однопетлевые поправки к электрическому току. Внешнее поле нарушает основное состояние теории, и происходит смешение квантовых уровней материи. После выключения поля начинается процесс термализации. Нас интересует только зависимость плотности заселенности уровней и аномального квантового среднего от длительности импульса. Поскольку мы рассматриваем теорию с нестационарным гамильтонианом, мы используем диаграммную технику Швингера–Келдыша. Оказывается, что однопетлевая поправка к электрическому току приводит только к перенормировке констант теории в древесном выражении для тока

$$j_1^{tree} \cong \frac{E^2 e^3 T}{2\pi^3} \cdot \exp \left[ -\frac{\pi m^2}{eE} \right],$$

в то время как однопетлевая поправка к фотонному пропагатору приводит к дополнительному росту тока по длительности импульса на двухпетлевом уровне.

### Литература

1. Akhmedov E. T., Astrakhantsev N., Popov F. K. Secularly growing loop corrections in strong electric fields // JHEP. 2014. V. 9: 71. DOI: 10.1007/JHEP09(2014)071.
2. Akhmedov E. T., Popov F. K. A few more comments on secularly growing loop corrections in strong electric fields // JHEP. 2015. V. 9: 85. DOI: 10.1007/JHEP09(2015)085.

УДК 530.145

## Петлевые поправки к рождению частиц в нелинейной резонансной полости

*Д. А. Трунин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Как правило, рождение частиц в сильных внешних полях рассматривают в древесном приближении, пренебрегая взаимодействием между частицами (т. е. нелинейностями системы) [1]. В том числе это относится к динамическому эффекту Казимира, описывающему рождение частиц на фоне ускоренно движущегося зеркала (или нескольких зеркал). Однако в действительности древесное приближение хорошо работает только для достаточно малых времен эволюции, на которых эффекты секулярной памяти

проявляются слабо [2, 3]. На больших же временах корректно оценить число рождающихся частиц, тензор энергии-импульса и другие наблюдаемые величины можно только после пересуммирования лидирующих секулярно растущих петлевых поправок из всех порядков теории возмущений.

В этом докладе я расскажу, как подобное суммирование можно провести для нелинейного динамического эффекта Казимира в резонансной полости — иными словами, для безмассового скалярного поля с квартичным взаимодействием, зажатом между двумя идеально отражающими зеркалами, осциллирующими на удвоенной собственной частоте полости. Оказывается, что благодаря особому поведению мод квантованного поля в такой полости на больших временах доминирует только малый подкласс «квазиклассических» диаграмм, описывающих петлевые поправки к корреляционным функциям и квантовым средним. При этом число частиц, рождающихся в нелинейной резонансной полости, на больших временах существенно превосходит число частиц, рождающихся в линейной полости, которая осциллирует с такой же частотой. Полученные результаты имеют не только большое теоретическое значение, но и могут пригодиться для более точного описания экспериментов по проверке динамического эффекта Казимира, которые фактически так же работают со слабо нелинейными полями [4, 5].

### Литература

1. *Birrell N. D., Davies P. C. W.* Quantum Fields in Curved Space. — Cambridge: Cambridge University Press, 1984.
2. *Akhmedov E. T.* Curved space equilibration versus flat space thermalization: A short review // *Mod. Phys. Lett.* 2021. V. 36: 2130020.
3. *Berges J.* Introduction to nonequilibrium quantum field theory // *AIP Conf. Proc.* 2004. V. 739. P. 3–62.
4. *Wilson C. M.* [et. al.]. Observation of the dynamical Casimir effect in a superconducting circuit // *Nature.* V. 479. 2011. P. 376.
5. *Lähteenmäki P.* [et. al.]. Dynamical Casimir effect in a Josephson metamaterial // *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2013. V. 110(11). P. 4234–4238.

УДК 514.745.82

## Дуальность Руйсенаарса между тригонометрической моделью Калоджеро и рациональной моделью Руйсенаарса как спектральная дуальность

*Е. С. Трунина*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Одно из направлений в исследовании интегрируемых систем — поиск возможных дуальностей между интегрируемыми моделями. Два известных примера таких дуальностей — это спектральная дуальность и дуальность Руйсенаарса. Спектральная дуальность описывает двойственность между спиновыми системами, чье представление Лакса зависит от спектрального параметра  $z$ . Спектральные кривые для таких дуальных систем совпадают; в частности, дуальными оказываются тригонометрическая модель Годена и цепочка Гейзенберга [1]. Дуальность Руйсенаарса, или  $rq$ -дуальность, для  $N$ -частичных систем строит соответствие между переменными координаты одной системы и переменными действия другой. Такая дуальность известна, например, между тригонометрической моделью Калоджеро и рациональной моделью Руйсенаарса–Шнайдера [2]. Мы показали, что  $rq$ -дуальность для этих моделей может быть описана в рамках спектральной дуальности. В частности, можно сделать калибровочное преобразование, добавляющее в матрицу Лакса системы тригонометрического Калоджеро зависимость от спектрального параметра и не меняющее при этом уравнение Лакса. Прделав такое преобразование, мы показали, что полученная матрица Лакса может быть сведена к годеповскому типу. Спектрально дуальная система после обратного калибровочного преобразования матрицы Лакса превращается в матрицу Лакса рациональной модели Руйсенаарса–Шнайдера. Таким образом, нами было показано, что данный случай дуальности Руйсенаарса является примером спектральной дуальности.

### Литература

1. *Mironov A., Morozov A., Runov B., Zenkevich Y., Zotov A.* Spectral Duality Between Heisenberg Chain and Gaudin Model // *Lett. Math. Phys.* 2013. V. 103. P. 299–329.
2. *Ruijsenaars S.* Action-angle maps and scattering theory for some finite-dimensional integrable systems III. Sutherland type systems and their duals // *Publ. RIMS.* 1995. V. 31. P. 247–353.

## Исследование критической размерности вязкости при фазовом переходе бозе-флюида в сверхтекучее состояние

*Д. А. Давлетбаева<sup>1</sup>, Л. Мижишин<sup>2</sup>, М. Ю. Налимов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет  
<sup>2</sup>Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна

Исследование и теоретическое описание фазового перехода второго рода вещества в сверхтекучее состояние — важная задача современной теоретической физики. Классически принято считать, что вещество при данном переходе описывается стохастическими моделями F или E [1–3]. Однако модели F и E имеют несколько фиксированных точек [1, 4], из-за чего непонятно, какая из точек описывает исследуемый переход. В [5] было проведено микроскопическое исследование системы, в ходе которого было получено, что для системы, переходящей в сверхтекучее состояние, существует единственная ИК-существенная фиксированная точка. Найденная точка совпадает с фиксированной точкой, найденной для более простой модели A.

При феноменологическом анализе модели F оказалось, что учет сжимаемости влияет на ИК-существенность фиксированной точки и получаемая модель совпадает с двухкомпонентной моделью A.

Для учета сжимаемости к стационарному действию модели F добавляется поле скорости, а к системе стохастических уравнений добавляются уравнения Навье–Стокса. Стационарное действие модели имеет вид

$$S_{st} = \partial\psi^+\partial\psi + \frac{g_1(\psi^+\psi)^2}{6} - g_2m\psi^+\psi + \frac{m^2}{2} + \frac{\rho v^2}{2}, \quad (1)$$

где  $\psi$ ,  $\psi^+$  — комплексный параметр порядка,  $g_1$ ,  $g_2$  — константы связи,  $m$  — линейная комбинация внутренней энергии и плотности,  $\rho$  — поле плотности среды,  $\mathbf{v}$  — векторное поле скорости.

Итоговая система стохастических уравнений:

$$\begin{aligned} (\partial_t + v_i\partial_i)\psi &= \lambda(1+ib)\left(\partial^2\psi - \frac{g_1(\psi^+\psi)\psi}{3} + g_2m\psi\right) + i\lambda g_3\psi\left(g_2\psi^+\psi - m - \frac{v^2}{2}\right) + f_\psi, \\ (\partial_t + v_i\partial_i)\psi^+ &= \lambda(1-ib)\left(\partial^2\psi^+ - \frac{g_1(\psi^+\psi)\psi^+}{3} + g_2m\psi^+\right) - i\lambda g_3\psi^+\left(g_2\psi^+\psi - m - \frac{v^2}{2}\right) + f_{\psi^+}, \\ \partial_t m + \partial_i(\rho v_i) &= -\lambda u \partial^2\left(g_2\psi^+\psi - m - \frac{v^2}{2}\right) + i\lambda g_3(\psi^+\partial^2\psi - \psi\partial^2\psi^+) - c^2\partial_i v_i + f_m, \\ \rho(\partial_t v_i + v_j\partial_j v_i) &= \gamma\partial^2 v_i + \frac{3\zeta + \gamma}{3}\partial_i\partial_j v_j - (\partial_i\psi^+)\left(\partial^2\psi - \frac{g_1\psi^+\psi^2}{3} + g_2m\psi\right) + \rho\partial_i\left(\frac{v^2}{2}\right) - \\ &\quad - (\partial_i\psi)\left(\partial^2\psi^+ - \frac{g_1\psi(\psi^+)^2}{3} + g_2m\psi^+\right) + (c^2 + \rho)\partial_i\left(g_2\psi^+\psi - m - \frac{v^2}{2}\right) + f_v, \end{aligned} \quad (2)$$

где было положено  $\rho = \rho_0 + m$  и отброшены старшие (больше 1) порядки по  $m$ ;  $\rho_0$  — средняя плотность,  $\lambda$  — кинетический коэффициент;  $b$ ,  $g_3$  — коэффициенты межмодовой связи;  $u$  — непертурбативный заряд модели F;  $c$  — скорость звука;  $f_i$  — случайное поле.

По системе стохастических уравнений было получено MSR-динамическое действие. Для построения ИК-эффективной теории необходимо отбросить наименее существенные члены из действия. В результате размерного анализа оказалось, что они входят в квадратичную часть действия, поэтому их влияние на диаграммы теории возмущений неочевидно. Поэтому согласно [7] был проведен анализ

пропагаторов — наименее существенные были отброшены, по ИК-существенным пропагаторам было построено ИК-эффективное действие:

$$-S_{\text{dyn,eff}} = b_1 \psi'^+ \psi'^+ + a_1 \psi'^+ \partial^2 \psi + a_2 \psi' \partial^2 \psi^+ - \psi'^+ \partial_i \psi - \psi' \partial_i \psi^+ + \psi'^+ [a_8 \psi^+ \psi^2 - \frac{a_9 a_{24} (\psi^+ \psi^2)}{a_7}] + \psi' [a_{11} (\psi^+)^2 \psi - \frac{a_{12} a_{24} (\psi^+)^2 \psi}{a_7}], \quad (3)$$

где  $a_i, b_i$  — некоторые комбинации физических параметров. Полученное действие отличается от действия двухкомпонентной модели  $A$  растяжением полей и параметров.

В результате размерного анализа оказалось, что вязкости являются ИК-несущественными. Их критические размерности предлагается определять по критическим размерностям составных операторов, при которых вязкость является источником в MSR-динамическом действии:

$$f_1 = \partial_i v'_j \partial_i v'_j, \quad f_2 = \partial_j v'_j \partial_i v'_i, \quad f_3 = v'_i \partial^2 v_i, \quad f_4 = v'_i \partial_i \partial_j v_j. \quad (4)$$

Канонические размерности приведенных операторов — 8 и 6. В безмассовой схеме при ренормировке смешиваются операторы одной канонической размерности [1], смешивание составных операторов приводит к смешиванию их источников, размерность источника определяется как теневая:  $\Delta = d + z - \Delta_f$ , где  $d$  — размерность пространства,  $z$  — динамический индекс,  $\Delta_f$  — критическая размерность  $f$ .

Был проведен анализ, результатом которого оказалось, что критическая размерность вязкости определяется наиболее существенной критической размерностью составных операторов размерности 8, к ним примешиваются операторы меньших размерностей (6, 4, 2), недостающая размерность компенсируется степенями управляющего параметра  $\tau$ . В данный момент проводится исследование данных операторов, расчет критической размерности вязкости.

## Литература

1. *Vasil'ev A. N.* The field theoretic renormalization group in critical behavior theory and stochastic dynamics. — Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 2004.
2. *Hohenberg P. C., Halperin B. I.* Theory of dynamic critical phenomena // *Rev. Mod. Phys.* 1977. V. 49. P. 435–479.
3. *Folk R., Moser G.* Critical dynamics: A field-theoretical approach // *J. Phys. A.* 2006. V. 39. P. R207–R313.
4. *Danco M., Hnatic M., Komarova M. V., Lucivjansk'ý T., Nalimov M. Yu.* Superfluid phase transition with activated velocity fluctuations: Renormalization group approach // *Phys. Rev. E.* 2016. V. 93(1):012109.
5. *Zhavoronkov Y. A., Komarova M. V., Molotkov Y. G., Nalimov M. Yu., Honkonen J.* Critical dynamics of the phase transition to the superfluid state // *Theor. Math. Phys.* 2019. V. 200. P. 1237–1251.
6. *Halperin B. I., Hohenberg P. C., Siggia E. D.* Renormalization-group treatment of the critical dynamics of superfluid helium, the isotropic antiferromagnet, and the easy-plane ferromagnet // *Phys. Rev. B.* 1975. V. 13. P. 1299–1328.
7. *Nalimov M., Nikitin I. S.* Infrared permutation theory as a method for excluding sonic modes from stochastic dynamics equations // *Vestnik SPbU.* 1999. No. 4. P. 105–109.

УДК 530.1

## Космологическая инфляция в моделях модифицированной гравитации

*В. А. Шмидт<sup>1,2</sup>, А. Б. Арбузов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна

За последние годы существенно повысились качество космологических наблюдений и анализ получаемых астрофизических данных. Это позволило верифицировать различные модели модифицированной гравитации и подкрепило теорию космологической инфляции, которая на сегодняшний день дает наиболее вероятный сценарий эволюции ранней Вселенной, поскольку успешно решает проблемы (горизонта, плоскостности, энтропии, первичных возмущений и др.) стандартной теории горячего Большого взрыва, связанные, как известно, с закладыванием в нее весьма неестественных начальных условий.



Инфляционный сценарий реализуется в самых разнообразных теориях, среди которых можно выделить, например, скалярно-тензорные модели с неминимальной связью, кинетическую и векторную инфляции, модели  $\alpha$ -аттракторов и проч.

В настоящей работе изучалась следующая скалярно-тензорная полевая теория при наличии неминимальной кинетической связи:

$$S[g_{\mu\nu}, \varphi] = \int d^4x \sqrt{-g} \left\{ -\frac{2}{\kappa^2} R + \beta \kappa^2 G^{\mu\nu} \nabla_\mu \varphi \nabla_\nu \varphi + \frac{1}{2} g^{\mu\nu} \nabla_\mu \varphi \nabla_\nu \varphi - V(\varphi) \right\}, \quad (1)$$

где  $g = \det g_{\mu\nu}$ ,  $R$  — скалярная кривизна,  $\varphi$  — скалярное поле,  $\beta$  — безразмерный параметр связи,  $G_{\mu\nu}$  — тензор Эйнштейна, константа  $\kappa$  связана с ньютоновской постоянной  $G$  как  $\kappa^2 = 32\pi G$ , а потенциал

$$\begin{aligned} V(\varphi) = & -m^4 \frac{\ln 2}{64\pi^2} + \frac{m^2}{2} \left[ 1 + \frac{m^2 \kappa^2}{32\pi^2} (1 + \ln 4) \right] \varphi^2 + \\ & + \frac{m^4}{128\pi^2} (1 - \sqrt{1 - 4\kappa^2 \varphi^2} - 2\kappa^2 \varphi^2) \ln (1 - \sqrt{1 - 4\kappa^2 \varphi^2}) + \\ & + \frac{m^4}{128\pi^2} (1 + \sqrt{1 - 4\kappa^2 \varphi^2} - 2\kappa^2 \varphi^2) \ln (1 + \sqrt{1 - 4\kappa^2 \varphi^2}). \end{aligned} \quad (2)$$

Как было показано в [1], однопетлевые квантовые поправки к простейшим скалярно-тензорным теориям генерируют неминимальное кинетическое взаимодействие Джона  $G^{\mu\nu} \nabla_\mu \varphi \nabla_\nu \varphi$  из модифицированной гравитации Хорндески, а эффективный потенциал вида (2), согласно работе [2], динамически наводится также на уровне первых петлевых поправок. Таким образом, модель с эффективным действием (1) является наиболее простой скалярно-тензорной теорией, учитывающей квантовые поправки.

При отсутствии кинетической связи ( $\beta = 0$ ) инфляция ведется потенциалом и возникает при выполнении условий медленного скатывания. В работе были определены начальные условия для инфлатона  $\varphi_0(m)$  в зависимости от массы  $m$ , необходимые для реализации более или менее успешной космологической инфляции. При относительно небольших массах, как легко заметить из вида потенциала, квантовые поправки подавлены, и реализуется стандартный сценарий инфляции в квадратичном потенциале с достаточно малым  $r$  — отношением и чрезмерно малым наклоном спектра. При достаточно больших массах квантовые поправки в потенциале начинают доминировать (рис. 1). Здесь может возникать некоторого рода нестабильность при слишком больших массах  $m$  инфлатона: введение скалярного поля с большой массой может не позволить реализовать инфляцию, согласованную с последними экспериментальными данными по наклону спектра  $n_s - 1$ .

Если включить в рассмотрение неминимальную кинетическую связь, то может сработать экзотический сценарий, при котором космологическую инфляцию по очереди будут вести и кинетическое взаимодействие, и эффективный потенциал, что составляет предмет дальнейших исследований.

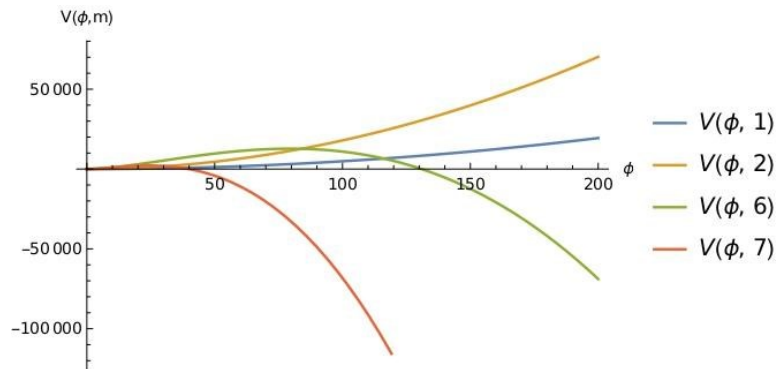


Рис. 1. График зависимости потенциала от значения скалярного поля в зависимости от  $m$  (в единицах  $\kappa^{-1}$ ).

### Литература

1. *Latosh B.* One-loop effective scalar-tensor gravity // *Eur. Phys. J. C.* 80(9): 845. 2020.
2. *Arbuzov A., Latosh B.* Effective potential of scalar-tensor gravity // *Class. Quant. Grav.* 38(1): 015012. 2021.

**Вычисление вкладов первых порядков по константе связи  
в вакуумную энергию скалярной КТП с дробным самодействием**

*Н. А. Игнатюк<sup>1,2</sup>, С. Л. Озарков<sup>1</sup>, Д. В. Склянный<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Сколковский институт науки и технологий

<sup>3</sup>Weizmann Institute of Science

В данной работе рассмотрена евклидова квантовая теория скалярного поля с действием:

$$S[\phi(x)] = \frac{1}{2} \int d^d x d^d y L(x, y) \phi(x) \phi(y) + g \int dx |\phi(x)|^\alpha, \quad 1 \leq \alpha \leq 2$$

для вещественных  $\alpha$ . В первом слагаемом в правой части данного выражения функция (распределение)  $L(x, y)$  — ядро оператора  $\hat{L}$ , задающего квадратичную часть действия нелокальной КТП (свободную теорию). Нелокальная КТП может рассматриваться как регуляризация евклидовой теории Клейна–Гордона, но также представляет и самостоятельный интерес. Отметим, что ядро обратного оператора  $(\hat{L})^{-1}$  является ультрафиолетово конечным пропагатором  $G(x, y)$  нелокальной КТП в любой размерности пространства  $d$ . Мы будем предполагать случай трансляционно-инвариантной свободной теории  $G(x, y) = G(x - y)$ , но при этом рассматривать теорию «в ящике»  $V$ . Далее, второе слагаемое в правой части действия — действие дробного взаимодействия,  $g$  — константа связи. Для теорий с дробными степенями стандартная квантово-полевая техника теории возмущений (ТВ) должна быть модифицирована [3, 4]. Для большой статистической суммы (большой статсуммы)

$$Z = \int D\phi e^{-\frac{1}{2} \int d^d x d^d y L(x, y) \phi(x) \phi(y) - g \int dx |\phi(x)|^\alpha dx}$$

с помощью разложения лагранжиана взаимодействия в интеграл Фурье

$$|\phi(x)|^\alpha = \int e^{it\phi(x)\mathcal{F}} [|\phi(x)|^\alpha](t) \frac{dt}{2\pi},$$

разложения экспоненты от действия взаимодействия в ряд и вычисления в каждом члене ряда соответствующего гауссового интеграла, получено разложение  $Z$  в виде суммы канонических статсумм  $Z_n$  (с фиксированными «числами частиц»  $n$ ). Такое разложение представляет собой сходящийся ряд по константе взаимодействия  $g$ :

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} Z_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} g^n \left\{ \prod_{a=1}^n \int dx_a \int d\phi_a |\phi_a|^\alpha \right\} \frac{e^{-\frac{1}{2} \sum \phi_a (G^{(n)})^{-1} \phi_b}}{\sqrt{\det(G^{(n)})}}$$

где элементы матрицы  $G^{(n)}$  задаются по правилу  $G_{ab}^{(n)} = G(x_a - x_b)$ .

В случае целых  $\alpha$  в таком разложении  $n$ -й член представлял бы собой сумму всех «диаграмм» с  $n$  вершинами, что видно, поскольку при целой степени интегралы по  $\phi_a$  вычисляются методом (трюком) введения источника, что приводит нас к стандартной виковской комбинаторике. При этом  $n$ -й член ряда удовлетворяет оценке (константы  $C_n$  растут показательным образом):

$$|Z_n| \leq C_n n^{\frac{n\alpha}{2}-n} G(0)^{\frac{n\alpha}{2}} g^n V^n, \quad C_n \sim \text{const} \cdot n^k q^n,$$

что говорит о сходимости ряда при  $\alpha < 2$ . Как обычно, большие статсуммы рассматриваемого вида можно записать в виде экспоненты энергии вакуума [1], представив все вклады в виде экспоненты связанных:

$$Z = e^{-Vf(g)} = 1 - Vf(g) + \frac{1}{2} V^2 f(g)^2 + \dots$$

где  $f(g)$  регулярна при бесконечных  $V$ , поскольку с точки зрения статистической физики представляет собой давление. Это дает рецепт получения функции  $f(g)$  как коэффициента при  $V$ , что может быть удобным для практических вычислений [1, 2].

Можно явно вычислить канонические статсуммы с «числами частиц»  $n = 0, 1, 2, 3$ . При этом первые статсуммы могут быть записаны компактно:

$$Z_0 = 1, \quad Z_1 = -\frac{2^{\frac{\alpha+1}{2}}}{\sqrt{2\pi}} \Gamma\left(\frac{1}{2}(\alpha+1)\right) gV(G(0))^{\frac{\alpha}{2}},$$

$$Z_2 = \frac{2^{\alpha-1}}{\pi} \Gamma^2\left(\frac{1}{2}(\alpha+1)\right) g^2 G(0)^\alpha V \int dy \left(1 - \frac{G^2(y)}{G^2(0)}\right)^{\alpha+\frac{1}{2}} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}(\alpha+1), \frac{1}{2}(\alpha+1); \frac{1}{2}; \left(\frac{G(y)}{G(0)}\right)^2\right).$$

Подставляя вместо  $G(x)$  УФ-регуляризованную функцию Грина евклидова оператора Клейна–Гордона в размерности  $d$

$$G(x) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{e^{ikx}}{k^2 + m^2} \theta(\mu - |k|),$$

где  $\mu$  — параметр обрезки, а  $\theta(k)$  — функция Хэвисайда, мы можем асимптотически вычислить интеграл в выражении для  $Z_2$  при  $\frac{m^{d-2}}{G(0)} \ll 1$ , так как в этом случае он набирается на масштабах  $\mu|x| \gg 1$ . Для простоты рассмотрим случай  $d = 3$ , поскольку в старших размерностях требуется несколько более аккуратная работа из-за большей расходимости. Раскладывая гипергеометрическую функцию в ряд, мы приходим к следующему выражению:

$$Z_2 = \frac{2^{\alpha-1}}{\pi} \Gamma^2\left(\frac{1}{2}(\alpha+1)\right) g^2 V G(0)^\alpha \left(V + \frac{\alpha^2}{mG(0)^2}\right).$$

Далее получим соответствующее разложение (первые члены) по константе связи  $g$  для плотности энергии вакуума. Если ввести «эффективные» «константу связи»  $g_r = gG(0)^{\alpha/2}$  и «массу»  $m_r = m/\delta^2$ , выражение для энергии вакуума примет вид:

$$f(g, m)m^{-d} = a_1 \frac{gG(0)^{\alpha/2}}{m^d} + a_2 \left(\frac{gG(0)^{\alpha/2}}{m^d}\right)^2 \left(\frac{m^{d-2}}{G(0)}\right)^2 + \dots$$

$$a_1 = 2^{\frac{\alpha+1}{2}} \Gamma\left(\frac{1}{2}(\alpha+1)\right), \quad a_2 = \frac{2^{\alpha-1}}{8\pi} \Gamma^2\left(\frac{1}{2}(\alpha+1)\right),$$

где для большей общности мы выписали зависимость от размерных параметров в общей размерности  $d$ . Более подробное рассмотрение показывает, что и следующие порядки являются рядами по  $\frac{gG(0)^{\alpha/2}}{m^d}$  и  $\frac{m^{d-2}}{G(0)}$ .

Из данных выражений следует, что для нетривиальности полученных выражений следует удерживать выделенные параметры  $\frac{gG(0)^{\alpha/2}}{m^d}$  и  $\frac{m^{d-2}}{G(0)}$  постоянными. Таким образом, мы получили сходящиеся ряды ТВ для большой статсуммы и энергии вакуума по константе связи  $g$  в нелокальной КТП с дробным взаимодействием и явно вычислили первые канонические статсуммы (порядки ТВ), что и является оригинальным результатом настоящей работы.

Полный текст статьи с более подробным исследованием теории в ближайшее время уже доступен на [arxiv.org](https://arxiv.org) [2]. Там же представлены выражения для корреляторов младших порядков, а также рецепт вычисления общего члена ряда ТВ, основанный на приближении интеграндов полиномами.

## Литература

1. *Ruelle D.* Statistical mechanics: rigorous results. — London: Imperial College Press, 1999.
2. *Skliannyi D. V., Ogarkov S. L., Ignatyuk N. A.* Nonlocal Scalar QFT with Fractional Power Self-Interaction // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2303.16011.
3. *Bernard M., Guskov V. A., Ivanov M. G., Kalugin A. E., Ogarkov S. L.* Nonlocal scalar quantum field theory—functional integration, basis functions representation and strong coupling expansion // Particles. 2019. V. 2. P. 385–410. DOI: 10.3390/particles2030024.
4. *Ефимов Г. В.* Проблемы квантовой теории нелокальных взаимодействий. — М.: Наука, гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1985.

## Точные билинейные корреляторы в негауссовых матричных моделях

*К. Н. Цыбиков<sup>1,2</sup>, В. В. Мишняков<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Некоторые матричные модели обладают классическим свойством суперинтегрируемости, т. е. в них существует базис для корреляторов, каждый элемент которого может быть представлен точной формулой, что существенно упрощает процесс вычислений [1]. В эрмитовой гауссовой модели таким базисом являются полиномы Шура. Понятие суперинтегрируемости не ограничивается на классическом случае, а также может выражаться в появлении билинейных корреляторов, т. е. в существовании базиса, среднее от любого элемента которого с полиномом Шура пропорционально самому среднему от этого полинома Шура и, соответственно, является точной формулой, что подробно описано в работе [2]:

$$\langle K_{\Delta} S_R \rangle = \mu_{\Delta, R} \langle S_R \rangle. \quad (1)$$

В формуле (1)  $\Delta, R$  — диаграммы Юнга,  $S_R$  — соответствующий диаграмме  $R$  полином Шура,  $K_{\Delta}$  — элемент базиса искомым полиномов, соответствующий диаграмме  $\Delta$ . Среднее вычисляется согласно статистической сумме рассматриваемой матричной модели, а численный коэффициент  $\mu_{\Delta, R}$  не зависит от размера матрицы.

В настоящей работе найден новый способ получения точных билинейных корреляторов в мономиальной матричной модели для произвольной степени потенциала без явного построения  $W^-$ -операторов, затруднительного в негауссовом случае. Использованный способ основан на свойстве парных корреляторов  $\langle K_{\Delta} K_{\Delta'} \rangle = 0$  при  $|\Delta| \neq |\Delta'|$ , и позволяет индуктивно найти полный базис искомым полиномов.

Для выделенных степеней потенциала построены и явно показаны полиномы, являющиеся базисом для билинейных корреляторов. Проведена диагонализация этих полиномов и показаны обобщения части известных утверждений про билинейные корреляторы в гауссовой матричной модели.

### Литература

1. *Mironov A. D., Morozov A. Y.* Superintegrability Summary // Phys. Lett. B. 2022. V. 835: 137573.
2. *Mironov A. D., Morozov A. Y.* Bilinear character correlators in superintegrable theory // Eur. Phys. J. C. 2023. V. 83(1): 71.

## Эволюция Шрамма–Лёвнера (SLE) и ее связь с CFT и критическими двумерными моделями

*М. Д. Зотов*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Данная работа представляет собой часть обзора по SLE–CFT-соответствию. Она представляет собой введение в двумерные случайные конформно-инвариантные процессы роста кривых. В ней детально описаны построение и представление стохастической эволюции Шрамма–Лёвнера (SLE), которая является марковским процессом на верхней комплексной полуплоскости. SLE описывает интерфейсы в различных двумерных критических моделях (границы кластеров в критической точке модели Изинга).

Начинается она с рассмотрения примера модели на дискретной шестиугольной решетке и связи построенной на ней дискретной случайной кривой с некоторыми 2D-моделями статистической механики (перколяция, 2D-Изинг) [1]. Далее, в работе представлены и описаны геометрические свойства таких кривых, описанных эволюцией Шрамма–Лёвнера. В зависимости от величины коэффициента перед движущим членом в уравнении (движущая функция — броуновский процесс) кривая может быть либо простой — не касаться себя в процессе роста, либо самокасающейся, либо кривой Пеано. Такое поведение

наблюдается при непрерывном увеличении параметра величины броуновского движения. Далее для кривой вычисляется фрактальная размерность и некоторые другие геометрические величины [1, 10–12].

Далее, важная часть обзора посвящена отождествлению SLE с определенным параметром  $k$  с разными критическими моделями. И, самое главное, как следствие соответствия посчитаны некоторые параметры для критических моделей. Как пример вычислена вероятность пробоя в двумерной задаче перколяции [9].

Следующей важной частью работы является связь эволюции Шрамма–Лёвнера с конформной теорией поля. Приводится вывод связи параметра  $k$  из SLE и центрального заряда  $c$  из CFT. Также немаловажную часть SLE–CFT соответствия составляет поиск четырехточечных корреляционных функций с помощью методов SLE. [2–5, 8, 9].

В данной работе представлено детальное описание процессов эволюции Шрамма–Лёвнера, ее геометрических свойств, примеров применения к вычислению параметров в двумерных критических моделях, а также показано и построено ее соответствие с конформной теорией поля.

## Литература

1. *Cardy J.* SLE for Theoretical Physicists // arXiv preprint. [2005]. arXiv: cond-mat/0503313v2.
2. *Bauer M., Bernard D.* Conformal field theories of stochastic Loewner evolutions // *Comm. Math. Phys.* 2003. V. 239. P. 493–521.
3. *Bauer M., Bernard D.* SLE $_{\kappa}$  growth processes and conformal field theory // *Phys. Lett. B.* 2002. V. 543. P. 135–138.
4. *Bauer M., Bernard D.* SLE martingales and the Virasoro algebra // *Phys. Lett. B.* 2003. V. 557. P. 309–316.
5. *Bauer M., Bernard D.* CFTs of SLEs: the radial case // *Phys. Lett. B.* 2004. V. 583. P. 324–330.
6. *Bauer M., Bernard D.* Conformal transformations and the SLE partition function martingale // *Ann. Henri Poincaré.* 2004. V. 5. P. 289–326.
7. *Belavin A. A., Polyakov A. M., Zamolodchikov A. B.* Infinite conformal symmetry in two-dimensional quantum field theory // *Nucl. Phys. B.* 1984. V. 241. P. 333–380.
8. *Cardy J.* Conformal invariance and surface critical behavior // *Nucl. Phys. B.* 1984. V. 240. P. 514–532.
9. *Cardy J.* Critical percolation in finite geometries // *J. Phys. A.* 1992. V. 25. L201.
10. *Lawler G. F., Schramm O., Werner W.* Values of Brownian intersection exponents I: Half-plane exponents // *Acta Math.* 2001. V. 187(2). P. 237–273.
11. *Lawler G. F., Schramm O., Werner W.* Plane exponents // *Acta Math.* 2001. V. 187(2). P. 275–308.
12. *Lawler G. F., Schramm O., Werner W.* Two-sided exponents // *Ann. Inst. H. Poincaré Statist.* 2002. V. 38(1). P. 109–123.

УДК 530.145

## Восстановление нелинейных потенциалов по флуктуационным операторам

*Н. М. Колганов<sup>1,2</sup>, Ф. М. Хасанов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет

При изучении амплитуды туннелирования, например, в двумерном потенциале, возникает понятие флуктуационного оператора, который определяет квадратичное действие. На фоне топологического инстантона, т. е. инстантона с бесконечным периодом, он имеет вид оператора Пёшль–Теллера

$$K = -\partial_{\tau}^2 + m^2 - l(l+1) \operatorname{sech}^2 \tau,$$

для которого при целых значениях параметров  $l, m$  точно известен спектр, собственные функции, а также функция Грина. Некоторым выделенным значениям параметров также соответствуют потенциалы синус-Гордона, кубический, и перевернутый двумерный. Нашей целью является решение обратной задачи, а именно, зная параметры оператора Пёшль–Теллера, восстановить потенциал, флуктуационный оператор которого равен исходному. В результате мы получили бесконечное семейство потенциалов, в общем случае являющихся неаналитическими.

Идея восстановления потенциалов основана на том, что производная инстантонного решения по модулярному параметру, обычно имеющему смысл положения инстантона, является нулевой модой флуктуационного оператора. Таким образом, интегрируя известную нулевую моду флуктуационного оператора, мы получаем явное выражение для инстантонного решения. Инстантонное решение зависит от времени, поэтому, подставляя его в закон сохранения энергии для нулевой энергии, мы получим выраже-

ние для потенциала. Не всегда можно обратить инстантонное решение, однако мы всегда можем построить потенциал параметрически.

Для потенциала Пёшль–Теллера собственные функции есть присоединенные полиномы Лежандра  $P_l^k(th\tau)$ ,  $k = 1, \dots, l$ , а нулевой модой является  $P_l^m(th\tau)$ . В результате мы получаем, что потенциал  $V(x)$ , построенный с помощью описанной выше процедуры для параметров  $l, m$ , задается параметрически как

$$x = \int^{\tau(x)} dt P_l^m(th t), V(x) = \frac{1}{2}(P_l^m(th\tau(x)))^2.$$

Примеры графиков потенциалов для некоторых значений  $l, m$  приведены на рис. 1. Необычным результатом является то, что в большинстве случаев потенциалы не являются аналитическими функциями и имеют точки ветвления в плоскости комплексифицированной координаты.

Выше мы рассматривали систему в случае нулевой энергии, соответствующем бесконечному периоду. Возникает естественный вопрос, какой вид будет иметь флуктуационный оператор в случае конечных энергий и периодов. Например, для двумного потенциала флуктуационный оператор имеет Лапе [1]

$$L = -\partial_\tau^2 + l(l+1)k^2 sn^2(\tau, k) - h,$$

где  $h$  выражается через соответствующие  $k$  и  $l, m$ . Предел  $k \rightarrow 1$  соответствует случаю Пёшль–Теллера. Для большого числа параметров  $l, m$  мы показали, что это свойство сохраняется также и в более общем случае. В то же время связь энергии с соответствующим значением модулярного параметра  $E = E(k)$  в общем случае является достаточно сложной. Мы показали, что эта связь дается уравнением

$$v(k)\partial_k \left[ v(k) \int_0^\tau d\tau' \eta_0(\tau') \right] = \frac{\partial E(k)}{\partial k} \eta_0(\tau) \int_0^\tau \frac{d\tau'}{(\eta_0(\tau'))^2},$$

где  $\eta_0$  есть нулевая мода для соответствующих  $l, m$ . Решение этого уравнения является предметом дальнейших исследований.

Дальнейшей задачей является также описание найденных потенциалов: вычисление квантовых периодов, необходимых для квазиклассического квантования, нахождения уравнения Пикара–Фукса для периодов и установление с их помощью ресургентных соотношений [2, 3].

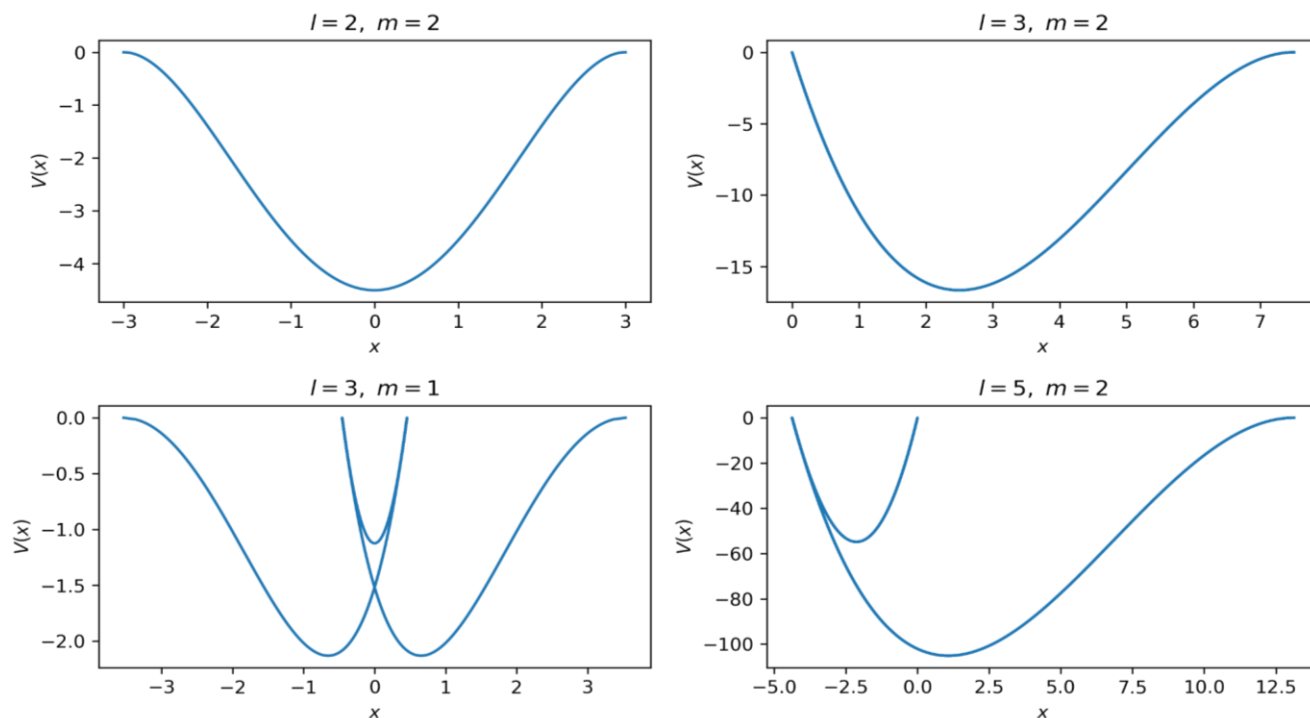


Рис. 1. Потенциалы, построенные по флуктуационным операторам Пёшль–Теллера, для некоторых параметров  $l$  и  $m$

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075–15–2022–287 от 06.04.2022).

## Литература

1. *Ward R. S.* The Nahm equations, finite-gap potentials and Lamé functions // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1987. V. 20(10). P. 2679.
2. *Basar G., Dunne G. V., Ünsal M.* Quantum geometry of resurgent perturbative/nonperturbative relations // *J. High Energy Phys.* 2017. V. 2017(5): 87.
3. *Fischbach F., Klemm A., Nega C.* WKB method and quantum periods beyond genus one // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2019. V. 52(7): 075402.

УДК 530.225

### Теоретико-числовая перенормировка энергии вакуума

**В. А. Дудченко<sup>1</sup>, М. Г. Иванов<sup>2</sup>, В. В. Наумов<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рассмотрим бозонную квантовую теорию поля на решетке  $\mathbb{Z}^d(N)$  с гамильтонианом вида

$$\widehat{H}_b = \sum_{\mathbf{p} \in \mathbb{Z}^d(N), \mathbf{p}^2 \in D} E(\mathbf{p}^2) \left( 2\widehat{b}_p^\dagger \widehat{b}_p + 1 \right), \quad \mathbf{p}^2 = \sum_{k=1}^d p_k^2 \in \mathbb{Z}(N), \quad [\widehat{b}_{\mathbf{p}_1}, \widehat{b}_{\mathbf{p}_2}^\dagger] = \delta_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2} \hat{1}.$$

Гамильтониан фермионной квантовой теории поля на решетке имеет аналогичный вид. Как для бозонов, так и для фермионов мы ограничились случаем одной поляризации, случай произвольного числа поляризаций может быть рассмотрен полностью аналогично.

Энергия вакуума представляет собой сумму энергий нулевых колебаний для всех допустимых значений импульса, и поскольку  $\mathbf{p}^2 \in \mathbb{Z}(N)$ , величина  $\mathcal{E}$  может быть выражена через кратности  $c(k)$  величин  $p^2$ , равных значению  $k$ :

$$\mathcal{E}_{vac} = \mathcal{E} = \sum_{\mathbf{p} \in \mathbb{Z}^d(N), \mathbf{p}^2 \in D} E(\mathbf{p}^2) = \sum_{k \in D \subset \mathbb{Z}(N)} c(k) E(k) \in \mathbb{Z}(N),$$

$c(k) = c_{Nd}(k) =$  (число узлов  $\mathbf{p}$  решетки  $\mathbb{Z}^d(N)$  таких, что  $\mathbf{p}^2 \equiv k \pmod{N}$ ).

Энергия вакуума представляет собой сумму отрицательных энергий всех фермионов моря Дирака (для всех допустимых значений импульса), имеет с обратным знаком тот же вид.

**Теорема.** Для произвольного  $N$  при  $d \geq 3$  и для  $N = 2^n$  при  $d \geq 2$   
 $\forall k \in \mathbb{Z}(N)$  верно, что  $c_{Nd}(k) \equiv 0 \pmod{N}$ .

В основной работе приведено несколько доказательств Теоремы методами, доступными молодым ученым, знакомым с основами теории чисел [1, 2]. При выполнении условий Теоремы (для произвольного  $N$  при  $d \geq 3$ , и для  $N = 2^n$  при  $d \geq 2$ ) для произвольной функции  $E: D \rightarrow \mathbb{Z}(N)$  энергия вакуума, посчитанная в кольце вычетов  $\mathbb{Z}(N)$  (квазиэнергия), обнуляется:

$$\mathcal{E} \equiv 0 \pmod{N}.$$

Поскольку на трехмерной решетке квазиэнергия вакуума перенормируется в нуль для произвольного размера решетки, возникает вопрос, можно ли воспользоваться предельным переходом  $N \rightarrow \infty$ , чтобы перейти от КТП на решетке к КТП в непрерывном пространстве. Можно ли перенести построенную теоретико-числовую перенормировку на непрерывный случай? Есть основания полагать, что такой перенос возможен. В серии статей [3, 4] было рассмотрено представление координаты и импульса с помощью последовательности цифр в произвольной системе счисления. При этом перенормировка на решетке описывалась как смена представления  $\mathbb{Z}(N)$ : переход от представления  $\{0, 1, \dots, N-1\}$  к представлению  $\{-n, -n+1, \dots, 0, 1, \dots, N-n-1\}$ . Такая решеточная перенормировка дает естественные обобщения для непрерывного предела, при котором неперенормированный ряд переходит в перенормированный. Простейшее из таких обобщений (на решетке оно работает только при  $q = 2$ ):

$$x = \sum_{s=-\infty}^{+\infty} d(s, x) q^s \quad \rightarrow \quad x' = \frac{1}{q-1} \sum_{s=-\infty}^{+\infty} [d(s-1, x) - d(s, x)] q^s.$$

Здесь  $d(s, x)$  — цифра номер  $s$  числа  $x$  в  $q$ -ричной системе счисления. Цифра предполагается периодической функцией от  $x$ :

$$d(s, x) = d(s, x + q^{s+1}).$$

Неперенормированный ряд для  $x$  для некоторых систем счисления может расходиться для отрицательных чисел (если используются цифры из набора  $0, 1, \dots, q - 1$ ) или для положительных чисел (если используются цифры из набора  $0, -1, \dots, -q + 1$ ) или для всех чисел (если используется набор цифр, не содержащий 0). Перенормированный ряд сходится во всех перечисленных случаях.

То, что квазиэнергия вакуума оказалась равна нулю для любого размера решетки, а также то, что теоретико-числовая перенормировка была ранее определена не только для конечной решетки, но и на числовой прямой, представляется весомым аргументом в пользу физической осмысленности перехода к непрерывному пределу  $N \rightarrow \infty$ .

Непосредственное вычисление теоретико-числовой перенормировки в непрерывном случае, возможно, будет облегчено найденным ранее [3, 4] интегральным представлением вещественных чисел. Теоретико-числовая перенормировка в таком представлении имеет вид:

$$x = \int_{s=-\infty}^{+\infty} d(s, x) q^s ds \rightarrow x' = \frac{1}{q-1} \int_{s=-\infty}^{+\infty} [d(s-1, x) - d(s, x)] q^s ds.$$

Здесь номер цифры  $s$  пробегает все вещественные (включая дробные) значения:

$$d(s, x) = d(0, x \cdot q^{-s}).$$

Другая форма теоретико-числовой перенормировки для интегрального представления получается интегрированием по частям с отбрасыванием граничных членов:

$$x = \int_{s=-\infty}^{+\infty} d(s, x) q^s ds \rightarrow x'' = -\frac{1}{\ln q} \int_{s=-\infty}^{+\infty} \frac{d(d(s, x))}{ds} q^s ds.$$

Функция  $d(s, x)$  испытывает скачки (между скачками она кусочно-постоянна), поэтому производная  $\frac{d(d(s, x))}{ds}$  понимается в смысле обобщенных функций.

Интегральное представление вещественных чисел является переопределенным (достаточно знать любую серию значений  $d(s, x)$  с единичным шагом по  $s$ ), но зато в интегральном представлении отсутствуют выделенные масштабы (в представлении в виде ряда по  $s \in \mathbb{Z}$  выделены масштабы вида  $q^s$ ).

Исследуемые задачи представляются интересными и с теоретико-числовой точки зрения. В процессе исследования одним из нас (В. Н.) была сформулирована и предварительно численно проверена гипотеза, обобщающая Теорему на случай произвольных степеней.

## Литература

1. *Виноградов И. М.* Основы теории чисел. — М.: Наука, 1965.
2. *Боревич З. И., Шафаревич И. Р.* Теория чисел. — М.: Наука, 1985.
3. *Ivanov M. G.* Binary representation of coordinate and momentum in quantum mechanics // Theor. Math. Phys. 2018. V. 196(1). P. 1002–1017.
4. *Ivanov M. G., Polushkin A. Y.* Ternary and binary representation of coordinate and momentum in quantum mechanics // AIP Conference Proceedings. 2021. V. 2362: 040002.



## Деформация 11-мерной супергравитационной модели в формулировке $SL(5)$ исключительной теории поля

*С. А. Баракин<sup>1,2</sup>, Э. Т. Мусаев<sup>1,3</sup>, К. А. Губарев<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова

НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>Казанский федеральный университет «Институт физики»

11-мерная супергравитация, будучи фоново зависимой теорией, нуждается в фиксировании фона, для которого наблюдаемые величины набираются на возмущениях фона. Такая теория является богатой на такие точные решения теорией с точки зрения обширного состава полей для наблюдателя в низких размерностях и в то же время является проблемной в плане получения их явного вида. По этой причине важным вопросом является генерирование решений.

Исключительные теории поля позволяют сформулировать 11-мерную супергравитацию в явно ковариантном виде относительно соответствующей группы  $U$ -дуальности. В представленной работе мы изучаем  $SL(5)$ -исключительную теорию поля [1]. Полями такой теории являются реперы, калибровочные вектора и скаляры. В ней удастся построить длинные производные и обобщенные потоки полей (обобщенные тензоры напряженности). В терминах таких потоков, являющихся аналогом коэффициентов неголономии, может быть дана полноценная геометрическая формулировка. Внутри такой геометрической формулировки интерес представляют внутренние диффеоморфизмы, сохраняющие уравнения движения. Они и являются желаемыми деформациями 11-мерной супергравитации.

В представленной работе рассмотрена описанная выше деформация в терминах  $SL(5)$ -исключительной теории поля. Для этого были использованы методы формулирования данной теории и ее уравнений движения в терминах потоковых тензоров относительно обобщенных диффеоморфизмов. Внутри этой формулировки рассмотрено условие инвариантности данных уравнений при такой деформации.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-72-10144.

### Литература

1. *Musaev E. T.* Exceptional field theory  $SL(5)$  // JHEP. 2016. V. 2: 12.
2. *Gubarev K. A., Musaev E. T.* Polyvector deformations in eleven-dimensional supergravity // Phys. Rev. D. 2021. V. 103: 066021.
3. *Bakhmatov I., Gubarev K. A., Musaev E. T.* Non-abelian tri-vector deformations in  $d=11$  supergravity // JHEP. 2020. V. 5: 113.

## Антиферромагнетик с анизотропией типа «легкая плоскость» в магнитном поле и электронный спиновый резонанс

*А. С. Щербаков<sup>1</sup>, О. И. Утесов<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет

<sup>3</sup>Санкт-Петербургская школа физико-математических и компьютерных наук, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Соединения DTN  $[NiCl_2-4SC(NH_2)_2]$  и его легированный бромом аналог DTNX изучаются в течение последних нескольких десятилетий в контексте квантовых фазовых переходов. Возможность контролируемым образом допировать DTN бромом делает удобным изучение эффектов беспорядка в магнитной системе таких экзотических состояний, как Бозе-стекло и стекло Мотта, а также квантовые фазовые переходы, обусловленные изменением обменных параметров [1].

Фитирование спектров неупругого рассеяния нейтронов показывает, что увеличение концентрации брома приводит к увеличению констант обменного взаимодействия и одноионной анизотропии [2]. В то же время эксперименты по спиновому резонансу (ESR) показывают уменьшение энергии оптического

магнона в центре зоны Бриллюэна при увеличении концентрации брома [3]. Данные два факта не могут быть объяснены в рамках линейной теории спиновых волн, так как она предсказывает увеличение щели при увеличении обменных констант.

В случае малого наклонного поля наблюдается эффект динамического диамагнетизма [4], заключающийся в смене знака восприимчивости в частотной зависимости, а также наблюдается появление щели в спектре.

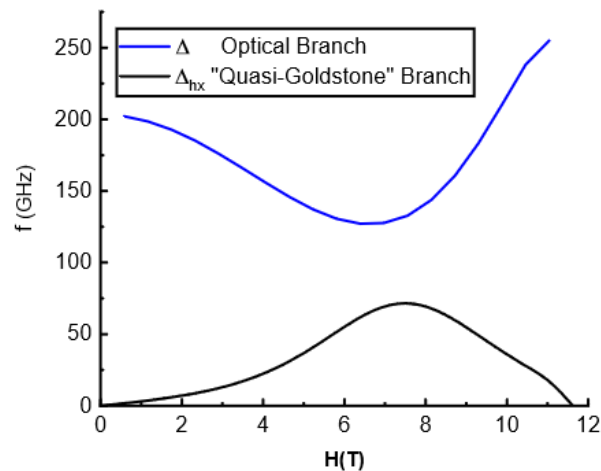


Рис. 1. Полевые зависимости частот «квазиголдстоуновских» (черная кривая) и «оптических» (синяя кривая) магнов в центре зоны Бриллюэна. Используемые параметры  $\alpha = \pi/60$ ,  $D = 8,0$  К,  $J_c = 2$  К и  $J_a = 0,2$  К

В наших работах [5] мы ставим целью аналитическое объяснение указанных выше экспериментальных данных.

Вещества DTN и DTNX можно рассматривать как слабосвязанные антиферромагнитные (АФ) цепочки со спином  $S = 1$  с сильной одноионной анизотропией типа легкая плоскость [6].

При учете квантовых флуктуаций уже в первом порядке по  $1/S$  появляется нелинейная зависимость спектра от параметров и возможность заработать уменьшение энергии оптического магнона в центре зоны Бриллюэна при увеличении параметров модели, а полевая зависимость имеет немонотонное поведение (см. рис. 1). Также показано, что оптическая ветвь вблизи центра упорядоченной фазы приобретает значительное затухание за счет двухмагнонных процессов распада.

Наличие малого поперечного поля нарушает вращательную симметрию. Это приводит к исчезновению голдстоуновской моды. Соответствующая магنونная мода становится щелевой, ниже она называется «квазиголдстоуновской». Используя формализм Кубо для линейного отклика, мы показали, что индуцируемая наклонным полем поперечная компонента восприимчивости приобретает сингулярность вблизи частоты квазиголдстоуновского магнона из-за процессов переброса, а за счет значительного затухания оптической ветви происходит изменение знака поперечной восприимчивости (см. рис. 2).

Таким образом, при использовании реалистичных параметров для DTN выводы нашей теории согласуются с экспериментальными данными.

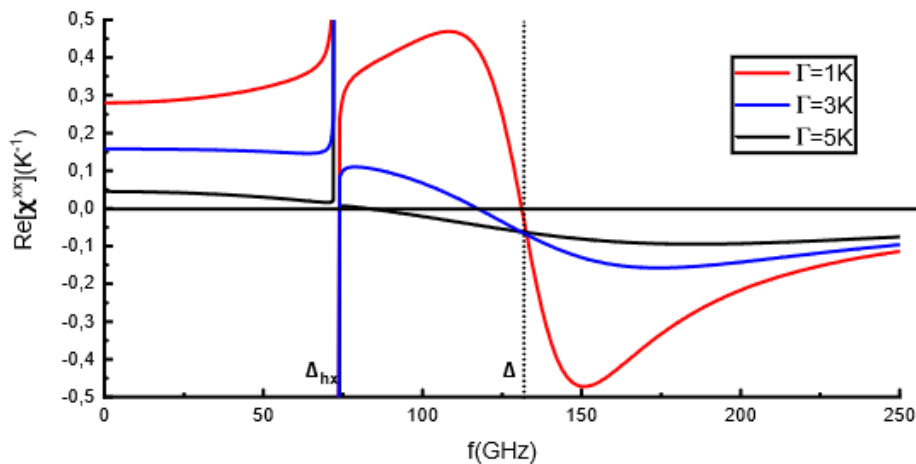


Рис. 2. Действительная часть спиновой восприимчивости при  $H = 7,3$  Т для различных констант затухания  $\Gamma$ . Использовались параметры  $\alpha = \pi/60$ ,  $D = 8,0$  К,  $J_c = 2$  К и  $J_a = 0,2$  К

Исследование было поддержано фондом развития теоретической физики и математики «Базис».

## Литература

1. Yu R. [et al.]. Bose glass and Mott glass of quasiparticles in a doped quantum magnet // Nature. 2012. V. 489(7416). P. 379–384.
2. Povarov K. Y., Wulf E., Hivonen D., Ollivier J., Paduan-Filho A., Zheludev A. Dynamics of a bond-disordered  $S=1$  quantum magnet near  $z=1$  criticality // Phys. Rev. B. 2015. V. 92(2): 024429.
3. Zvyagin S. A. [et al.]. Spin dynamics of  $\text{NiCl}_2\text{-4SC}(\text{NH}_2)_2$  in the field-induced ordered phase // Phys. Rev. B. 2008. V. 77(9): 092413.
4. Soldatov T. A., Smirnov A. I., Povarov K. Y., Paduan-Filho A., Zheludev A. Microwave dynamics of the stoichiometric and bond-disordered anisotropic  $S=1$  chain antiferromagnet  $\text{NiCl}_2\text{-4SC}(\text{NH}_2)_2$  // Phys. Rev. B. 2020. V. 101(10): 104410.
5. Sherbakov A. S., Utesov O. I. Magnon spectrum and electron spin resonance in antiferromagnet with large single-ion easy plane anisotropy // J. Magn. Magn. Mater. 2021. V. 518: 167390.
6. Sizanov A. V., Syromyatnikov A. V. Antiferromagnet with two coupled antiferromagnetic sublattices in a magnetic field // J. Phys.: Condens. Matter. 2011. V. 23(14): 146002.

УДК 539.12.01

## Изучение абелевой проекции в решеточной КХД

*И. Е. Кудров<sup>1,2</sup>, В. Г. Борняков<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт» — ИФВЭ

КХД обладает свойством конфайнмента — при низких температуре и плотности элементарные частицы этой теории (кварки и глюоны) не наблюдаются в свободном состоянии, а находятся в связанных состояниях — адронах. Есть подтверждение конфайнмента из экспериментов, а также из вычислений в решеточной КХД. Однако механизм конфайнмента пока что остается без объяснения. Один из критериев конфайнмента — линейный рост на больших расстояниях потенциала взаимодействия между статическими кварком и антикварком.

Существуют модели, которые претендуют на объяснение механизма конфайнмента. Одна из них — это теория дуального сверхпроводника. В ней конфайнмент объясняется конденсацией топологических флуктуаций — цвето-магнитных монополей [1].

Для определения монополей в КХД необходима фиксация абелевой калибровки. Результаты решеточной КХД показывают, что наиболее подходящей является максимальная абелева калибровка.

Для фиксации калибровки к полю последовательно применяется калибровочное преобразование, которое максимизирует функционал

$$F = \frac{1}{8V} \sum_{x,\mu} \left[ \left| U_\mu^{(11)}(x) \right|^2 + \left| U_\mu^{(22)}(x) \right|^2 + \left| U_\mu^{(33)}(x) \right|^2 - 1 \right], \quad (1)$$

где  $V$  — объем решетки, а затем делается абелева проекция — берутся только диагональные степени свободы. Хорошо известно, что потенциал, полученный из диагональных степеней свободы, с хорошей точностью воспроизводит линейную часть исходного потенциала. Это наблюдение поддерживает идею абелевой доминантности, что свидетельствует в пользу того, что монополярные степени свободы ответственны за конфайнмент. Отсюда возникает идея о разделении исходных степеней свободы на те, которые воспроизводят монополи, и те, которые монополи не содержат:

$$U_\mu(x) = U_\mu^{\text{mod}}(x) U_\mu^{\text{mon}}(x), \quad (2)$$

где  $U_\mu^{\text{mon}}(x)$  — монополярные степени свободы,  $U_\mu^{\text{mod}}(x)$  — безмонополярные.

В данной работе изучалась декомпозиция (2) в  $SU(3)$  глюодинамике. Эта декомпозиция изучалась ранее в  $SU(2)$  глюодинамике [2, 3]. Было показано, что  $U_\mu^{\text{mon}}(x)$  воспроизводит линейную часть потенциала,  $U_\mu^{\text{mod}}$  (неабелево модифицированное или безмонополярное поле) отвечает за кулоновскую часть, а сумма потенциалов примерно дает исходный:

$$V(R) \approx V_{\text{mod}}(R) + V_{\text{mon}}(R), \quad (3)$$

где  $R$  — расстояние между статическими кварками. Безмонопольные степени свободы воспроизводят кулоновский потенциал на всех расстояниях. Отсюда можно сделать предположение, что на малых расстояниях — это пертурбативный вклад в потенциал, а на больших — это флуктуации струны.

Вычисления производились в решеточной SU(3) глюодинамике для четырех значений решеточной константы связи  $\beta$ . В наших вычислениях шаг решетки меняется в диапазоне  $a = 0,093 \div 0,058$  Фм. Число узлов решетки изменялось таким образом, чтобы размер решетки в физических единицах оставался примерно постоянным,  $L \approx 2,1$  Фм. Для фиксации масштаба на решетке использовался параметр Зоммера  $r_0 = 0,5$  Фм [4, 5].

На рис. 1 изображена декомпозиция исходного потенциала  $V(R)$  на монополярный и безмонопольный в единицах  $r_0$ . Сумма монополярного и безмонопольного потенциалов хорошо аппроксимирует исходный потенциал. Однако эта декомпозиция выполняется приближенно. Наши исследования в SU(2) глюодинамике [3] указывают на то, что при уменьшении шага решетки эта декомпозиция становится более точной. Мы впервые проверяем эту декомпозицию в SU(3) глюодинамике для нескольких значений шага решетки. На рис. 2 изображены исходный и сумма монополярного и безмонопольного потенциалов для различных значений шага решетки. Наши результаты показывают, что точность декомпозиции не зависит от шага решетки. Одной из причин может быть то, что основной метод обнаружения монополей на решетке использует калибровочно неинвариантную процедуру. Поэтому, возможно, для более точной декомпозиции необходимо модифицировать саму процедуру или качество фиксации калибровки.

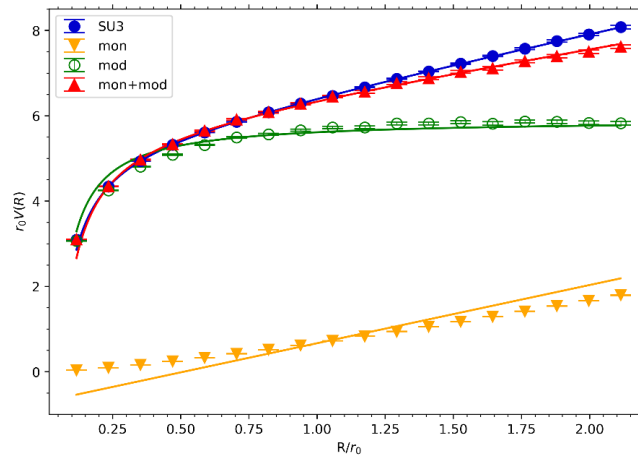


Рис. 1. Сравнение неабелевого потенциала  $V(R)$  (заполненные кружки) с суммой  $V_{\text{mod}}(R) + V_{\text{мон}}(R)$  (заполненные треугольники) для  $\beta = 6,3$  в единицах  $r_0$ .

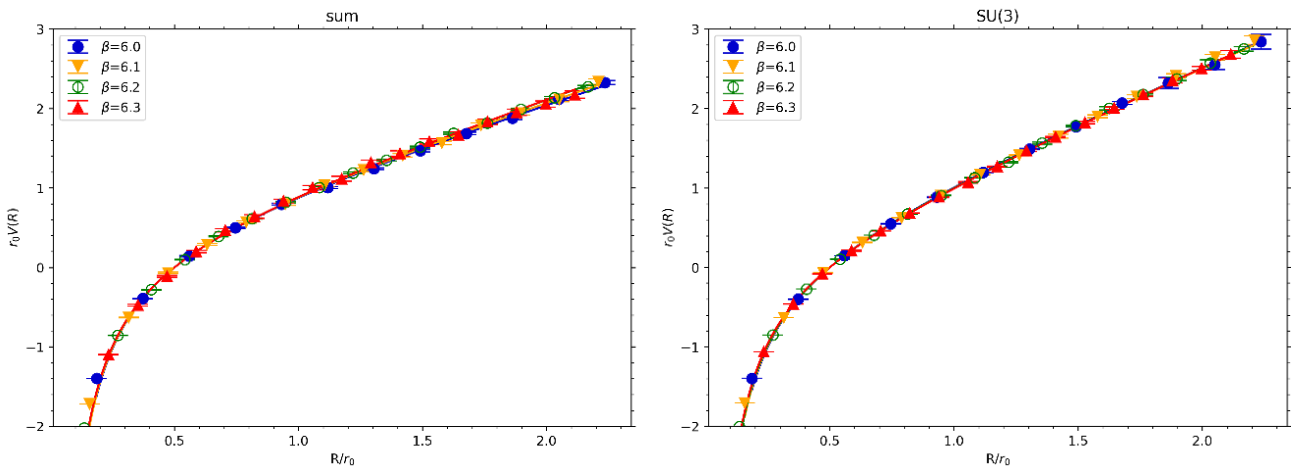


Рис. 2. Сравнение потенциалов в единицах  $r_0$  при разных значениях  $\beta$ . Для суммы монополярного и безмонопольного (слева) и для исходного SU(3) (справа)

## Литература

1. 't Hooft G. Topology of the gauge condition and new confinement phases in non-abelian gauge theories // Nucl. Phys. B. 1981. V. 190(3). P. 455–478.

2. *Borniyakov V. G., Polikarpov M. I., Schierholz G.* [et al.]. New features of the maximal abelian projection // Nucl. Phys. B. Proc. Suppl. 2006. V. 153. P. 25–32.
3. *Borniyakov V. G., Kudrov I., Rogalyov R. N.* Decomposition of the SU(2) gauge field in the maximal Abelian gauge // Phys. Rev. D. 2022. V. 105(5):054519.
4. *Necco S., Sommer R.* The  $N_f=0$  heavy quark potential from short to intermediate distances // Nucl. Phys. B. 2002. V. 622(1–2). P. 328–346.
5. *Sommer R.* A new way to set the energy scale in lattice gauge theories and its application to the static force and its application to the static force and  $\sigma_s$  in SU(2) Yang–Mills theory // Nucl. Phys. B. 1994. V. 411(2–3). P. 839–854.

УДК 532

## Ренормгрупповой анализ модели случайного роста

*М. А. Рейтер*

Санкт-Петербургский государственный университет

Исследуется модификация стохастического уравнения Кардара–Паризи–Занга (КПЗ) [1] — одной из наиболее популярных моделей случайного роста. Модель КПЗ описывается нелинейным дифференциальным уравнением на поле  $h(x, t)$ , ( $x$  —  $d$ -мерная координата,  $t$  — время):

$$\partial_t h = \kappa_0 \partial^2 h + \frac{\lambda_0}{2} (\partial h)^2 + \eta, \quad (1)$$

где  $\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$ ,  $\partial^2 = \partial_i \partial_i$ ,  $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$  ( $i = 1, \dots, d$ ),  $(\partial h)^2 = \partial_i h \partial_i h$ , по повторяющимся индексам подразумевается суммирование, коэффициент  $\kappa_0 > 0$ ,  $\eta$  — случайный шум. Рассматривается «замороженный» (не зависящий от времени) случайный шум с нулевым средним и парным коррелятором вида

$$\langle \eta(x) \eta(x') \rangle = \delta^{(d)}(x - x'). \quad (2)$$

Экспериментальные данные указывают [2] на то, что он лучше подходит для описания процессов эрозии ландшафтов и рельефа морского дна. Кроме того, учитывается влияние окружающей среды — рассмотрен перенос полем скорости  $v(x) \equiv \{v_i(x, t)\} : \partial_t h \rightarrow \nabla_i h = \partial_t h + (v_i \partial_i) h$ , которое удовлетворяет стохастическому уравнению Навье–Стокса для несжимаемой жидкости:

$$\nabla_i v_i = \nu_0 \partial^2 v_i - \partial_i \rho + f_i, \quad (3)$$

В формуле (3)  $\rho$  — давление,  $\nu_0$  — коэффициент кинематической вязкости. Случайная сила  $f_i$  определена парным коррелятором [3]:

$$\langle f_i(t, x) f_j(t', x') \rangle = D_0 \delta(t - t') \int \frac{dk}{(2\pi)^d} P_{ij}(k) \exp[i(k, x - x')] \quad (4)$$

с ортогональным проектором  $P_{ij}(k) = \delta_{ij} - k_i k_j / k^2$ . В (4)  $(k, x) = k_i x_i$ ,  $D_0 > 0$ ,  $k^2 = k_i k_i$ .

Стохастическая задача (1)–(4) эквивалентна [4] теоретико-полевой модели с удвоенным числом полей  $\{h, h', v_i, v'_i\}$ . Ренормгрупповой (РГ) анализ показал, что для обеспечения ренормируемости теории необходимо добавить нелинейность, пропорциональную квадрату скорости  $h' v_i v_i$ , снабженную новой безразмерной константой связи  $\sigma_0$ , и ввести дополнительный параметр  $\alpha_0$  в ковариантную производную для скалярного поля. Действие тогда запишется в виде:

$$S(h, h', v_i, v'_i) = \frac{1}{2} h' h' + h' \{-\partial_t h - \alpha_0 (v_i \partial_i) h + \kappa_0 \partial^2 h + \frac{\lambda_0}{2} (\partial h)^2\} + \frac{\sigma_0}{2} h' v^2 + v'_i \{-\partial_t v_i - (v_i \partial_i) v_i + \nu_0 \partial^2 v_i\} + \frac{1}{2} v'_i D_0 v'_i, \quad (5)$$

в слагаемых подразумеваются интегрирования по  $(x, t)$ .

Полученная теория будет логарифмичной в размерности пространства  $d = 4$ ; анализ уравнений РГ обнаруживает кривую неподвижных точек, которая содержит инфракрасно притягивающий сегмент при  $d < 4$ . Найдены критические размерности, отвечающие за асимптотическое поведение корреляционных функций исходной задачи. Все вычисления проведены в ведущем порядке теории возмущений (приближение одной петли, параметр разложения  $\varepsilon = 4 - d$ ).

### Литература

1. Kardar M., Parisi G., Zhang Y.-C. Dynamic scaling of growing interfaces // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56(9). P. 889–892.
2. Czirok A., Somfai E., Vicsek J. Experimental evidence for self-affine roughening in a micromodel of geomorphological evolution // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 71(13). P. 2154–2157.
3. Forster D., Nelson D., Stephen M. Long-time tails and the large-eddy behaviour of a randomly stirred fluid // Phys. Rev. Lett. 1976. V. 36(15). P. 867–870.
4. Vasil'ev A. N. the field theoretic renormalization group in critical behaviour theory and stochastic dynamics. — Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 2004.

УДК 539.12.01

### Эволюция поляризации электрона в лазерно-плазменном ускорителе

*М. А. Васильев<sup>1,2</sup>, В. А. Верейтин<sup>1,2</sup>, А. В. Корибут<sup>2</sup>, А. А. Севостьянова<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

В работе применяется метод сдвинутых гомотопий для решения системы уравнений Васильева–Прокушкина в трехмерной теории высших спинов.

$$dW + W * W = 0, \quad (1)$$

$$dB + W * B - B * W = 0, \quad (2)$$

$$dS + W * S + S * W = 0, \quad (3)$$

$\alpha$

$$S * S = i(dz^\alpha dz_\alpha + B * dz^\alpha dz_\alpha e^{iz_\alpha y^\alpha} k), \quad (4)$$

$$S * B - B * S = 0. \quad (5)$$

Система решается путем пертурбативного разложения по степеням производящего поля высших спинов  $C(y; \psi_{1,2}; k)$ . Алгебра симметрий пространства  $AdS_3$  представляется как прямая сумма  $o(2,2) \sim sp(2) \oplus sp(2)$ , где симплектическая алгебра, в свою очередь, реализуется на вейлевских осцилляторах  $[\widehat{y}_\alpha, \widehat{y}_\beta] = 2i\epsilon_{\alpha\beta}$ . Для работы с осцилляторами в вейлевском упорядочении переходят к мюловскому \*-произведению.

В нулевом, вакуумном, порядке разложения ( $W = W_0, B = 0, S = S_0$ ) находят решение для фоновой связности  $AdS_3$ :  $W_0(y|x) = \omega_0(y|x) + \lambda h_0(y|x)\psi_1$ , и связности дополнительных переменных  $S_0 = dz^\alpha z_\alpha$ .

На линейном уровне разложения ( $W = W_0 + W_1, B = 0 + C, S = S_0 + S_1$ ) уравнение ковариантного постоянства для поля  $C(y; \psi_{1,2}; k)$  распадается на две подсистемы в зависимости от степени вхождения инволютивного элемента  $\psi_2$ . Одна подсистема, имеющая бесконечное число степеней свободы и сводящаяся к уравнениям Клейна–Гордона и Дирака, называется динамической. Вторая, имеющая конечное число степеней свободы, называется топологической.

При дальнейшем прямом решении в уравнении ковариантного постоянства поля связности возникает перепутывание топологического и динамического секторов — уравнение на топологическое поле связности содержит в правой части динамическое поле материи, поэтому не может быть зафиксировано произвольным образом:

$$D_0 \omega^{\text{top}} = -\frac{\lambda^2}{16i} h_{0\gamma}^\alpha \wedge h_0^{\gamma\beta} (y_\alpha - p_\alpha)(y_\beta - p_\beta) C^{\text{dyn}}(0; \psi_1) \neq 0. \quad (6)$$

Здесь спиноры  $p_\alpha$  обозначают оператор производной по полному аргументу поля  $C(y; \psi_1)$ .

Для устранения этой проблемы уравнение для линейной поправки к связности решается с помощью метода сдвинутых гомотопий: решение записывается как действие разрешающего оператора, содержащего осцилляторы и производные полей материи и связности:

$$d_z W_1 = -\frac{1}{4i} [W_0 * C * (\Delta_p - \Delta_{p+t})\gamma - C * \widetilde{W}_0 * (\Delta_{p-2t} - \Delta_{p-t})\gamma] k, \quad (7)$$

$$\Delta_q J(z; y; dz) := (z^\alpha + q^\alpha) \frac{\partial}{\partial dz^\alpha} \int_0^1 \frac{dt}{t} J(tz - (1-t)q; y; t dz). \quad (8)$$

Поправка к решению находится в виде  $d_z$ -замкнутого выражения, содержащего свободные числовые параметры  $\alpha_i, \mu_i, \nu_i$ :

$$\delta W_1 = -\frac{\lambda}{4i} [h_0 * C^{\text{dyn}} * h_{Q_1(p,t,y)} \Delta_{p+t} \Delta_p \gamma + C^{\text{dyn}} * \widetilde{h}_0 * h_{Q_2(p,-t,y)} \Delta_{p-t} \Delta_{p-2t} \gamma] \psi_1 \psi_2 k, \quad (9)$$

где  $Q_i(p, t, y) = (\mu_i - \alpha_i + 1)p + (\nu_i - \alpha_i + 1)t + \alpha_i y$ .

Свободные параметры подбираются таким образом, чтобы ковариантная производная этой поправки  $D_0 \delta W_1$  компенсировала правую часть уравнения (6). Необходимые ограничения на параметры выражаются как

$$\mu_1 = \nu_1 = \alpha_1 - 1, \quad \mu_2 = \nu_2 = \alpha_2 + 1, \quad \forall \alpha_1, \alpha_2. \quad (10)$$

Таким образом, было найдено двухпараметрическое семейство решений системы уравнений высших спинов, в которых не перепутываются топологический и динамический секторы.

Если сравнить найденное семейство поправок с той, которая была найдена ранее прямыми методами,

$$\delta \omega^{\text{top}}(y) = -\frac{\lambda}{8i} \int_0^1 dt (1-t^2) h_0^{\alpha\beta} (y_\alpha - p_\alpha)(y_\beta - p_\beta) C^{\text{dyn}}(ty) \psi_1, \quad (11)$$

то можно увидеть, что их разность содержит зависящие от свободных параметров  $D_0$ -точные члены и два неустранимых кохомологических члена, которые являются замкнутыми, но не точными:

$$\delta W_1 - \delta \omega^{\text{top}} \psi_2 = -\frac{\lambda}{8i} \int_0^1 dt (1-t^2) h_0^{\alpha\beta} \cdot \left[ \left( \alpha_1 - \frac{1}{2} \right) (y_\alpha y_\beta - p_\alpha p_\beta) C^{\text{dyn}}(ty, \psi_1) + \left( \alpha_1 + \frac{1}{2} \right) (y_\alpha y_\beta - p_\alpha p_\beta) C^{\text{dyn}}(-ty, \psi_1) - (y_\alpha y_\beta + p_\alpha p_\beta) C_+^{\text{dyn}}(ty, \psi_1) + 2y_\alpha p_\beta C_-^{\text{dyn}}(ty, \psi_1) \right] \psi_1 \psi_2. \quad (12)$$

Здесь  $C_-^{\text{dyn}}$  и  $C_+^{\text{dyn}}$  обозначают четную и нечетную по  $y_\alpha$  части поля  $C^{\text{dyn}}$ .

Эти кохомологические члены можно добавить в правую часть уравнения ковариантного постоянства для поля материи:  $D_0 C = aG^+ + bG^-$ . Эта деформация не сводится к переопределению поля  $C(y; \psi_{1,2}; k)$  и при этом не нарушает совместности. Подстановка в деформированное уравнение выражения производящего поля  $C(y; \psi_{1,2}; k)$  через Вейлевские осцилляторы приводит его к виду

$$DC_{\alpha(n=2k)} = \frac{\psi_1}{2i} \left[ \left( 1 - \frac{a/2}{(n+1)(n+3)} \right) h_0^{\beta\gamma} C_{\beta\gamma\alpha(n)} - \lambda^2 n(n-1) \left( 1 - \frac{a/2}{(n-1)(n+1)} \right) h_{0\alpha\alpha} C_{\alpha(n-2)}^{\text{dyn}} \right], \quad (13a)$$

$$DC_{\alpha(n=2k-1)} = \frac{\psi_1}{2i} h_0^{\beta\gamma} C_{\beta\gamma\alpha(n)}^{\text{dyn}} + \frac{b \lambda \psi_1}{2 n+2} h_{0\alpha}^\beta C_{\beta\alpha(n-1)}^{\text{dyn}} - \frac{\psi_1}{2i} \lambda^2 n(n-1) h_{0\alpha\alpha} C_{\alpha(n-2)}^{\text{dyn}}. \quad (13b)$$

Эти уравнения имеют вид линеаризованных массивных уравнений трехмерной теории высших спинов, которые выводятся путем деформации алгебры Вейля  $[\widehat{y}_\alpha, \widehat{y}_\beta] = 2i\epsilon_{\alpha\beta}(1 + \nu k)$ . Уравнения с четным и нечетным числом индексов представляют массивные бозоны и фермионы соответственно.

## Литература

1. *Prokushkin S. F., Vasiliev M. A.* Higher-spin gauge interactions for massive matter fields in 3D AdS space-time // Nucl. Phys. B. 1999. V. 545. P. 385–433. DOI: 10.1016/S0550-3213(98)00839-6.
2. *Vasiliev M. A.* Equations of motion for  $d=3$  massless fields interacting through Chern-Simons higher-spin gauge fields // Mod. Phys. Lett. A. 1992. V. 7. P. 3689–3702. DOI: 10.1142/S0217732392003116.
3. *Vasiliev M. A.* Higher-spin gauge theories in four, three and two dimensions // Int. J. Mod. Phys. D. 1996. V. 5. P. 763–797. DOI: 10.1142/S0218271896000473.
4. *Kessel P., Lucena G'omez G., Skvortsov E., Taronna M.* Higher spins and matter interacting in dimension three // JHEP. 2015. V. 11: 104. DOI: 10.1007/JHEP11(2015)104.
5. *Gelfond O. A., Vasiliev M. A.* Homotopy operators and locality theorems in higher-spin equations // Phys. Lett. B. 2018. V. 786. P. 180–188. DOI: 10.1016/j.physletb.2018.09.038.

6. *Didenko V. E., Gelfond O. A., Korybut A. V., Vasiliev M. A.* Homotopy properties and lower-order vertices in higher-spin equations // *Phys. J. A.* 2018. V. 51(46): 465202. DOI: 10.1088/1751-8121/aae5e1.
7. *Vasiliev M. A.* Higher spin algebras and quantization on the sphere and hyperboloid // *Int. J. Mod. Phys. A.* 1991. V. 6. P. 1115–1135. DOI: 10.1142/S0217751X91000605.
8. *Vasiliev M. A.* Holography, unfolding and higher spin theory // *J. Phys. A.* 2013. V. 46: 214013. DOI: 10.1088/1751-8113/46/21/214013.
9. *Pope C. N., Romans L. J., Shen X.*  $W_\infty$  and the Racah-Wigner algebra // *Nucl. Phys. B.* 1990. V. 339. P. 191–221. DOI: 10.1016/0550-3213(90)90539-P.
10. *Bieliavsky P., Detournay S., Spindel P.* The Deformation Quantizations of the Hyperbolic Plane // *Commun. Math. Phys.* 2009. V. 289. P. 529–559. DOI: 10.1007/s00220-008-0697-9.
11. *Korybut A. V.* Covariant structure constants for a deformed oscillator algebra // *Theor. Math. Phys.* 2017. V. 193(1). P. 1409–1419. DOI: 10.1134/S0040577917100014.
12. *Korybut A.* Star product for deformed oscillator algebra  $A_q(2, \nu)^*$  // *Phys. J. A.* 2021. V. 54(50): 505202. DOI: 10.1088/1751-8121/ac367e.
13. *Barabanshchikov A. V., Prokushkin S. F., Vasiliev M. A.* Free equations for massive matter fields in (2+1)-dimensional anti-de Sitter space from a deformed oscillator algebra // *Teor. Mat. Fiz.* 1997. V. 110(3). P. 372–384. DOI: 10.1007/BF02630455.
14. *MacDowell S. W., Mansouri F.* Unified Geometric Theory of Gravity and Supergravity // *Phys. Rev. Lett.* 1977. V. 38. P. 739–742. DOI: 10.1103/PhysRevLett.38.739.
15. *Stelle K. S., West P. C.* Spontaneously broken de Sitter symmetry and the gravitational holonomy group // *Phys. Rev. D.* 1980. V. 21. P. 1466–1488. DOI: 10.1103/PhysRevD.21.1466.
16. *Vasiliev M. A.* Unfolded representation for relativistic equations in 2 + 1 anti-de Sitter space // *Class. Quant. Grav.* 1994. V. 11. P. 649–664. DOI: 10.1088/0264-9381/11/3/015.
17. *Didenko V. E., Misuna N. G., Vasiliev M. A.* Charges in nonlinear higher-spin theory // *JHEP.* 2017. V. 03: 164. DOI: 10.1007/JHEP03(2017)164.
18. *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. DOI: 10.1016/0370-2693(92)91457-K.
19. *Blencowe M. P.* A consistent interacting massless higher-spin field theory in  $D=2+1$  // *Class. Quant. Grav.* 1989. V. 6. P. 443–452. DOI: 10.1088/0264-9381/6/4/005.
20. *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. DOI: 10.1016/0003-4916(89)90261-3
21. *Zinoviev Y. M.* On Massive High Spin Particles in (A)dS // arXiv preprint. [2021]. arXiv: hep-th/0108192.
22. *Zinoviev Y. M.* Frame-like gauge invariant formulation for massive high spin particles // *Nucl. Phys. B.* 2009. V. 808. P. 185–204. DOI: 10.1016/j.nuclphysb.2008.09.020.
23. *Khabarov M. V., Zinoviev Y. M.* On massive higher spins in  $d=3$  // *JHEP.* 2022. V. 04: 055.

УДК 530.145

## Масса Дебая гравитона в пространстве де Ситтера

*Д. И. Садеков*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Одним из способов, позволяющих оценить поведение системы во внешнем поле, является изучение эффективных уравнений движения на малые возмущения полей, с которыми взаимодействует материя. Например, ранее Ф. К. Поповым было получено [1], что эффективная магнитная масса фотона, взаимодействующего со скалярным полем, равна нулю для любой геометрии пространства–времени типа Фридмана–Леметра–Робертсона–Уокера и для любого начального состояния материи, в то время как дебаевская масса отлична от нуля для альфа-вакуумов в пространстве де Ситтера.

С помощью нестационарной диаграммной техники Келдыша–Швингера мы найдем однопетлевое эффективное действие для гравитона на фоне пространства де Ситтера, взаимодействующего со скалярным полем, явно убедимся в калибровочной инвариантности эффективной теории и вычислим эффективную массу тензорной и скалярной мод гравитона. Поле метрики при этом рассматривается на классическом уровне. Оказывается, что в максимально симметричном состоянии Банча–Дэвиса эффективная масса равна нулю, что свидетельствует о стабильности этого фона и состояния.

В заключение мы обсудим связь наших результатов с аналогичными исследованиями, проводившихся на фоне пространства анти-де-Ситтера [2], где гравитон приобретает ненулевое значение массы благодаря наличию векторной моды в спектре состояний в данной теории, которая поглощается



тензорным полем метрики на петлевом уровне в духе механизма Хиггса. С этой же точки зрения будут сделаны предварительные выводы о том, приобретает ли фотон ненулевую массу в пространстве анти-де-Ситтера.

### Литература

1. *Popov F. K.* Debye mass in de Sitter space // *JHEP*. 2018. V. 2018: 33.
2. *Porrati M.* Higgs phenomenon for 4-D gravity in anti-de Sitter space // *JHEP*. 2002. V. 2002: 058.

УДК 537.9

## Вычисление многопетлевых диаграмм в динамических моделях теории критического поведения

*А. В. Треногин<sup>1</sup>, М. Ю. Налимов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет

<sup>2</sup>Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований

Приложение теории возмущений к задачам теории критического поведения тесным образом связано с проблемой эффективного счета диаграмм. В высших порядках теории возмущений, подсчет которых необходим для получения более точных теоретических значений, например критических индексов, количество и сложность вычисления диаграмм сильно возрастают. Наиболее успешные методы их вычисления основаны на использовании безмассовой теории и как импульсного, так и координатного представлений [1, 2]. Аналогичные методы могут быть применены и для расчета многопетлевых диаграмм в различных стохастических динамических моделях [3]. Вдобавок к этому, современные методы многопетлевых расчетов не обходятся без использования компьютерных программ.

Данный доклад посвящен одному из методов вычисления многопетлевых диаграмм на примере конкретной динамической модели [3]. Существенной особенностью этой модели является наличие комплексного непертурбативного заряда, входящего непосредственно в пропагаторы. Учитывая как это, так и то, что вычисления в динамике и в целом сложнее вычислений в статике, использование метода Sector Decomposition [4] становится слишком трудоемким и имеет низкую эффективность. На помощь приходит метод, являющийся развитием подходов [1, 2]. Сравнение с методом Sector Decomposition покажет его преимущества и недостатки. Рассматриваются существующие и разрабатываемые пути по его улучшению и развитию. В конечном итоге, использование современных компьютерных мощностей и вышеупомянутого метода может очень существенно ускорить многопетлевые вычисления в динамике.

### Литература

1. *Антонов Н. В., Васильев А. Н.* Критическая динамика как теория поля // *ТМФ*. 1984. Т. 60. № 1. С. 59–71.
2. *Васильев А. Н.* Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамики. — Санкт-Петербург: Изд-во Петербургского института ядерной физики, 1998.
3. *Honkonen J., Komarova M., Molotkov Yu., Nalimov M., Trenogin A.* Critical dynamics of the superfluid phase transition: Multiloop calculation of the microscopic model // *Phys. Rev. E*. 2022. V. 106: 014126.
4. *Gudrun H.* Sector Decomposition // *Int. J. Mod. Phys. A*. 2008. V. 23(10). P. 1457–1486.

УДК 530.145

## Аналитичность и инвариантность корреляционных функций в пространствах Минковского и де Ситтера

*М. Н. Милованова*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Задачей квантовой теории поля является вычисление корреляционных функций. Например, в стационарном случае в физике высоких энергий обычно рассматривают пуанкаре-инвариантные

корреляторы. В  $x$ -пространстве они являются аналитическими функциями в комплексной плоскости геодезического (или гиперболического) расстояния [1].

На фоне же сильных полей поведение корреляторов как функций от времени изучено не очень хорошо. Ситуация усугубляется еще больше на фоне гравитационных полей, зависящих от времени. В таком случае корреляционные функции зависят от каждого своего аргумента по отдельности. Более того, в случае сильных внешних полей перестают работать обычные методы, которые используются в физике высоких энергий, поскольку условия их применимости требуют условие стационарности и ограниченности снизу спектра гамильтониана.

Следовательно, для того чтобы понять, например, поведение полей в ранней Вселенной, необходимо вычислить корреляторы в нестационарных ситуациях. В нестационарных ситуациях корреляционные функции однозначно задаются выбором начальных условий, в которые входят начальное состояние и тип поверхности Коши. Поэтому, чтобы изучить корреляторы с разными начальными условиями, мы будем исследовать их в разных регионах пространства-времени Минковского и пространства-времени де Ситтера [1].

Мы рассмотрим массивную скалярную теорию поля с взаимодействием в правом и верхнем квадрантах пространства-времени Минковского, а также в статическом регионе пространства де Ситтера, в расширяющемся и сжимающемся регионах Пуанкаре пространства де Ситтера. Во всех этих ситуациях мы будем рассматривать инвариантные относительно изометрий состояния. Мы покажем, что техника Фейнмана [2] дает неправильный ответ при вычислении петлевых поправок, по этой причине во всех вышеописанных ситуациях мы будем использовать диаграммную технику Келдыша–Швингера. Мы покажем, что для изометрически инвариантных состояний при применении техники Келдыша–Швингера петлевые поправки к пропагаторам являются функциями от геодезических расстояний в правом квадранте пространства Минковского, в статическом регионе и расширяющемся регионе Пуанкаре в пространстве де Ситтера [3].

После этого мы увидим, что в верхнем квадранте пространства Минковского и в сжимающемся регионе Пуанкаре пространства де Ситтера петлевые поправки для изометрически инвариантных состояний не сохраняют инвариантность соответствующих пространств. В сжимающемся регионе де Ситтера после ультрафиолетового обрезания петлевые поправки к корреляционным функциям оказываются бесконечными из-за инфракрасного вклада, если начальную поверхность Коши убрать на минус бесконечность [3].

## Литература

1. *Akhmedov E. T., Artemev A. A., Kochergin I. V.* Interacting quantum fields in various charts of anti-de Sitter spacetime. In: *Phys. Rev. D.* 2021. V. 103(4):045009. DOI: 10.1103/PhysRevD.103.045009.
2. *Akhmedov E. T., Kochergin I. V., Milovanova M. N.* Isometry invariance of exact correlation function in various charts of Minkowski and de Sitter spaces // arXiv preprint. [2022]. arXiv: 2210.10119.
3. *Akhmedov E. T.* Lecture notes on interacting quantum fields in de Sitter space // *Int. J. Mod. Phys. D.* 2014. V. 23(1): 1430001. DOI: 10.1142/S0218271814300018.

УДК 530.1

## Число узлов волновой функции связанного состояния в рамках суперсимметричной квантовой механики

*А. Б. Айнбунд*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В рамках суперсимметричной квантовой механики построено элегантное замкнутое доказательство о числе узлов волновой функции связанного состояния, равное номеру возбуждения основного состояния. Это доказательство самодостаточно и является комплементарным к стандартному классическому результату теории обыкновенных дифференциальных уравнений в виде последовательности нескольких теорем.

Подсчет количества внутренних узлов в волновых функциях связанных состояний в классических курсах квантовой механики известен как осцилляторная теорема. Теорема связывает порядковый номер возбужденного состояния с числом его узлов. Обычное доказательство, скажем, в классической книге Ф. Березина и М. Шубина [1] представляет собой набор теорем, лемм, следствий и предпологов в теории

дифференциальных уравнений Штурма–Лиувилля. Такой способ является строгим и выглядит идейно простым, прямолинейным и математическим, в то время как физические объяснения просто дают некоторые качественные пояснения, но их недостаточно, чтобы быть полными доказательствами (см., например, [2]). В некоторых случаях существует метод, основанный на когерентной квантовой структуре, который обеспечивает элегантный и физически понятный способ вывода осцилляторной теоремы с помощью суперсимметрии в одномерной квантовой механике. Этот метод основан на конструкции, введенной М. Крумом [3] и включенной в суперсимметрию Э. Виттеном [4], как рассмотрено в [5–7].

Введение классических определений для суперсимметричных генераторов, через которые и выражаются суперсимметричные гамильтонианы, позволяет показать, что действие оператора, который определен в [3] и [8], приводит к следующему свойству:

$$A^+ \Psi_1^{(2)} = \Psi_1'^{(2)} + \frac{\Psi_0'}{\Psi_0'} \Psi_1^{(2)} = \frac{(\Psi_0 \Psi_1^{(2)})'}{\Psi_0'} = \langle \text{ог} \rangle = A^+ (A^- \Psi_1^{(1)}) = (E_1 - E_0) \Psi_1^{(1)}.$$

Основываясь на этом свойстве и используя математический аппарат суперсимметричной квантовой механики, в настоящей работе доказано, что число узлов волновой функции увеличивается ровно на единицу при переходе к следующему возбужденному состоянию.

Представленное доказательство подсчета внутренних узлов волновых функций связанных состояний является современным и оригинальным. Мы считаем, что одним из возможных применений настоящего результата является возможность включить его в учебники по современной квантовой механике, чтобы обеспечить некоторое знакомство с современными суперсимметричными концепциями и математическими методами, необходимыми в современной науке.

### Литература

1. *Berezin F. A., Shubin M.* The Schrödinger Equation. — Dordrecht: Springer, 2012.
2. *Moriconi M.* Nodes of Wavefunctions // Am. J. Phys. 2007. V. 75(3). P. 284–285. arXiv: quant-ph/0702260.
3. *Crum M. M., Quart J.* Associated Sturm-Liouville systems // Math. Oxford Ser. 1955. V. 2(6). P. 121–127. arXiv: physics/9908019.
4. *Witten E.* Dynamical breaking of supersymmetry // Nucl. Phys. B. 1981. V. 188. P. 513–554.
5. *Sukumar C. V.* Supersymmetric quantum mechanics of one-dimensional systems // Phys. A: Math. Gen. 1985. V. 18(15). P. 2917–2936.
6. *Генденштейн Л. Э., Криве И. В.* Суперсимметрия в квантовой механике // УФН. 1985. Т. 146. № 4. С. 553–590.
7. *Cooper F., Khare F., Sukhatme U.* Supersymmetry and Quantum Mechanics // Phys. Rep. 1995. V. 25. P. 267–385. arXiv: hep-th/9405029.
8. *Darboux M. G.* Sur une Proposition Relative aux équations Linéaires // Comptes Rendus. 1882. V. 94. P. 1456–1459.

---

## Секция биофизики

---

Председатель: И. В. Манухов (д. б. н., профессор)

Зам. председателя: П. К. Кузьмичев (к. ф.-м. н.)

Секретарь: С. О. Мишина

---

Дата: 06.04.2023

Время: 14:00

УДК: 577.322

### Отслеживание конформационных изменений белков при помощи сольватохромных красителей на основе хромофорного ядра GFP

**А. С. Белоусов<sup>1</sup>, И. А. Маслов<sup>1</sup>, П. А. Хорн<sup>1</sup>, А. С. Мишин<sup>2</sup>, М. С. Баранов<sup>2</sup>, Е. Ю. Зерний<sup>3</sup>,  
С. Е. Пермяков<sup>4</sup>, А. В. Мишин<sup>1</sup>, В. И. Борщевский<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт биоорганической химии им. акад. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН

<sup>3</sup>Институт физико-химической биологии им. Белозерского, Московский государственный университет

<sup>4</sup>Институт биологического приборостроения с опытным производством РАН

Зеленый флуоресцентный белок (GFP) является незаменимым инструментом для спектроскопических исследований, от визуализации *in vivo* до отслеживания отдельных молекул [1]. Структурно модифицированные синтетические аналоги хромофора GFP представляют разнообразный класс бензилиден имидазолонов, которые нашли множество применений в качестве универсальных меток благодаря их исключительным флуоресцентным свойствам, малому размеру и простоте синтеза [2].

Тиолреактивные варианты чувствительных к окружению меток часто используются для изучения структурных изменений в белках [3, 4]. При таком подходе метка прикрепляется к остатку цистеина (намеренно введенному или присутствующему естественным образом), расположенному вблизи функционально лабильных белковых элементов. В успешных конструкциях флуоресцентные свойства метки сообщают об активации или ингибировании белка. Эти работы дополняют молекулярные механизмы активации белка и в некоторых случаях облегчают создание биомолекулярных сенсоров для широкого спектра метаболитов [5, 6]. Несмотря на широкий спектр применения, метки на основе хромофорного ядра GFP раньше не использовались для этой цели.

Рековерин представляет собой белок с массой 23 кДа, относящийся к суперсемейству EF-hand Ca<sup>2+</sup>-связывающих белков. Одной из функций рековерина является регулирование активности родопсина GRK1, регулирующей активность родопсина [7]. При тусклом окружающем освещении уровень кальция в палочковидных клетках сетчатки высок, поэтому рековерин связывается с кальцием, высвобождает миристоиловую группу, прикрепляется к липидному бислою и ингибирует родопсин-киназу. Высвобождение миристоилового группы при активации значительно изменяет конформацию белка, что делает рековерин удобным для экспериментов по отслеживанию конформационных состояний белков [8].

Рецепторы, связанные с G-белком (GPCR), — это самый большой класс мембранных белков у человека, который регулирует важнейшие процессы, например зрение, вкус, нейротрансмиссию и воспаление. Более трети лекарств, одобренных FDA, нацелены на взаимодействие с GPCR в качестве своих основных мишеней [9]. Связывание лиганда приводит к структурным изменениям по всему GPCR и влияет на его взаимодействие с родственными G-белками или другими внутриклеточными партнерами. Орто-стерические лиганды непосредственно контролируют активность GPCR: агонисты активируют рецептор, антагонисты занимают сайт связывания лиганда, но не влияют на активность рецептора, а обратные агонисты инактивируют рецептор.

Целью работы было нахождение красителей на основе хромофорного ядра GFP, способных быть чувствительными к окружению для сообщения об активации белков. Для этого мы использовали четыре красителя на основе хромофорного ядра GFP и произвели флуоресцентное мечение двух белков: бычьего

рековерина (bRec) и GPCR. Наконец, с помощью наилучшей флуоресцентной конструкции, отобранной с помощью bRec и отклика спектров эмиссии на присутствие кальция, мы протестировали лиганды GPCR и обнаружили ответ на различные их типы. С помощью этого комплекса мы наблюдали структурные изменения в рецепторе, индуцированные полными агонистами, антагонистами и аллостерическим модулятором. Было проверено, что мечение белков происходит специфично и не нарушает их функциональности. Мы показали, что изменения в эмиссии флуоресценции меченого белка позволяют достоверно отличать лиганды разных классов и дают представление о структурных изменениях, которые эти лиганды индуцируют во внутриклеточной части рецептора.

Работа выполнена при поддержке Министерство науки и высшего образования РФ (№ 075-03-2023-106, проект FSMG-2020-0003).

### Литература

1. *Zimmer M.* Green fluorescent protein (GFP): Applications, structure, and related photophysical behavior // *Chem. Rev.* 2002. V. 102(3). P. 759–781.
2. *Walker C. L.* [et al.]. Fluorescence imaging using synthetic GFP chromophores // *Curr. Opin. Chem. Biol.* 2015. V. 27. P. 64–74.
3. *Simard J. R.* [et al.]. Fluorophore labeling of the glycine-rich loop as a method of identifying inhibitors that bind to active and inactive kinase conformations // *J. Am. Chem. Soc.* 2010. V. 132(12). P. 4152–4160.
4. *Rasheed M.* [et al.]. Ligand-dependent dynamics of the active-site lid in bacterial dimethylarginine dimethylaminohydrolase // *Biochemistry.* 2014. V. 53(6). P. 1092–1104.
5. *Goguen B. N., Loving G. S., Imperiali B.* Development of a fluorogenic sensor for activated Cdc42 // *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2011. V. 21(17). P. 5058–5061.
6. *Donaldson T.* [et al.]. Engineering a switch-based biosensor for arginine using a *Thermotoga maritima* periplasmic binding protein // *Anal. Biochem.* 2017. V. 525. P. 60–66.
7. *Zang J., Neuhauss S. C. F.* The binding properties and physiological functions of recoverin // *Front. Mol. Neurosci.* 2018. V. 11: 473.
8. *Ames J. B., Ishima R., Tanaka T.* Molecular mechanics of calcium — myristoyl switches // *Nature.* 1997. V. 389(6647). P. 198–202.
9. *Hauser A. S.* [et al.]. Pharmacogenomics of GPCR Drug Targets // *Cell.* 2018. V. 172(1–2). P. 41–54.

УДК 576.08

### Исследование транспорта субъединицы теломеразы TERT в митохондриях

*Д. С. Буркатовский, И. В. Маслов, А. О. Богородский, В. И. Борщевский*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Теломераза — это рибонуклеопротеин, присутствующий в эукариотических клетках. Большая его часть находится в ядре, где он выполняет функцию по удлинению теломер на хромосомах. Однако это не единственная функция теломеразы. Известно, что TERT, белковая субъединица теломеразы, присутствует также в митохондриях клетки [1]. Более того, при окислительном стрессе концентрация TERT в митохондриях повышается [1–3]. Показано, что TERT выполняет в них функцию по защите митохондриальной ДНК [1, 2].

В данной работе изучался ряд моментов, связанных с функцией TERT в митохондриях. Во-первых, транспорт TERT в митохондрии. Показано, что при окислительном стрессе в митохондриях наблюдается повышенная концентрация TERT. Однако транспортная машинерия митохондрии плохо приспособлена для транспортировки крупных белков, таких как TERT [4]. Существуют две гипотезы о том, как TERT попадает в митохондрии. Первая: зрелый TERT перемещается из ядра, подвергаясь рефолдингу в процессе. Вторая: клетка синтезирует новый TERT, вероятно, котрансляционно. Во-вторых, белки-партнеры, с которыми TERT взаимодействует в митохондрии. Одним из возможных партнеров является белок MnSOD (SOD2) — марганцевая супероксиддисмутаза. Методом FRET проверялось наличие взаимодействия между TERT и MnSOD при окислительном стрессе.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-03-2023-106, проект FSMG-2020-0003).

## Литература

1. *Haendeler J.* [et al.]. Mitochondrial telomerase reverse transcriptase binds to and protects mitochondrial DNA and function from damage // *Arterioscler. Thromb. Vasc. Biol.* 2009. V. 29. P. 929–935.
2. *Ahmed S.* [et al.]. Telomerase does not counteract telomere shortening but protects mitochondrial function under oxidative stress // *J. Cell Sci.* 2008. V. 121. P. 1046–1053.
3. *Santos J. H., Meyer J. N., Van Houten B.* Mitochondrial localization of telomerase as a determinant for hydrogen peroxide-induced mitochondrial DNA damage and apoptosis // *Hum. Mol. Genet.* 2006. V. 15. P. 1757–1768.
4. *Bogorodskiy A.* [et al.]. Accessing Mitochondrial Protein Import in Living Cells by Protein Microinjection // *Front. Cell Dev. Biol.* 2021. V. 9: 698658. DOI: 10.3389/fcell.2021.698658.

УДК 577.29

### Подготовка образца рецептора класса GPCR, ассоциированного с патогенезом рассеянного склероза, для структурных исследований

*Н. А. Сафронова, Т. С. Куркин, М. Б. Шевцов, В. И. Борщевский, И. С. Охрименко, Ю. А. Загрядская, А. В. Мишин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рецепторы, сопряженные с G белком (англ. G protein-coupled receptors, сокр. GPCR) — большое семейство рецепторов, включающее в себя около 800 семиспиральных трансмембранных белков (~4% от кодирующего белки генома человека). Рецепторы класса GPCR вовлечены в огромное количество физиологических процессов: зрение, вкус, обоняние, регуляция поведения и настроения, эмбриональное развитие и т. п. Различные GPCR связываются с самыми разными классами химических соединений — от малых молекул до пептидов и белков, и, учитывая значительную вовлеченность этих рецепторов в физиологические процессы, они являются важными мишенями для лекарственных препаратов. По некоторым оценкам, до 50% лекарств на рынке нацелены на рецепторы класса GPCR. [1]

В данной работе исследуется один родопсиноподобный рецептор, филогенетически близкий к цистеинил-лейкотриеновым и к пуриновым рецепторам. Этот GPCR-рецептор играет важную роль в развитии ЦНС, в частности, является регулятором формирования миелиновой оболочки нейронов. Рецептор экспрессируется в клетках-предшественниках олигодендроцитов (англ. Oligodendrocyte precursor cells, OPC) строго на определенной стадии их развития; экспрессия рецептора прекращается одновременно с началом формирования миелина. Искусственно созданная устойчивая экспрессия рассматриваемого рецептора у мышей приводит к нарушению формирования миелина и к симптомам, схожим с симптомами рассеянного склероза. При этом полная потеря мышами гена этого рецептора не приводит к серьезным последствиям для здоровья [2, 3].

Рассматриваемый рецептор также играет определенную роль при различных повреждениях ЦНС, в частности, при травмах и ишемических повреждениях. В окрестностях повреждения он экспрессируется в поврежденных нейронах, в клетках микроглии, а спустя некоторое время — и в OPC, которые участвуют в восстановлении данного участка ЦНС. Есть данные, что ингибирование этого рецептора уменьшает повреждения при моделировании ишемии у крыс. [4]

Все вышесказанное делает описываемый рецептор привлекательной мишенью для разработки новых лекарственных препаратов, в частности, для терапии при рассеянном склерозе и других нейродегенеративных заболеваниях, при которых нарушается миелиновая оболочка нейронов. Особенно актуальна задача поиска селективных и эффективных ингибиторов для этого рецептора, обладающих минимальными побочными эффектами. Структура рецептора высокого разрешения поможет решить эту задачу. Для получения структуры рецептора необходимо наладить гетерологичную экспрессию, чтобы наработать рецептор в достаточных количествах, а также добиться того, чтобы очищенный белок был достаточно стабильным и мономерным.

В данной работе мы создали генно-инженерную конструкцию рецептора для экспрессии в клетках насекомых *Sf9* и дальнейшей очистки. Генно-инженерная конструкция и протокол выделения и очистки рецептора были оптимизированы для получения наибольшего выхода белка и его наилучшей стабильности. Был получен образец рецептора в комплексе с Gi белком и фрагментом антитела ScFv16 для исследований методом просвечивающей криоэлектронной микроскопии.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (договор № 075-03-2023-106, проект FSMG-2020-0003).

## Литература

1. Yang D., Zhou Q., Labroska V. [et al.]. G protein-coupled receptors: structure- and function-based drug discovery // Signal Transduct. Target Ther. 2021. V. 6(1): 7. DOI: 10.1038/s41392-020-00435-w.
2. Chen Y., Wu H., Wang S. [et al.]. The oligodendrocyte-specific G protein-coupled receptor GPR17 is a cell-intrinsic timer of myelination // Nat. Neurosci. 2009. V. 12(11). P. 1398–1406. DOI: 10.1038/nn.2410.
3. Hennen S., Wang H., Peters L. [et al.]. Decoding signaling and function of the orphan G protein-coupled receptor GPR17 with a small-molecule agonist // Sci. Signal. 2013. V. 6(298): ra93. DOI: 10.1126/scisignal.2004350.
4. Ciana P., Fumagalli M., Trincavelli M.L. [et al.]. The orphan receptor GPR17 identified as a new dual uracil nucleotides/cysteinyll-leukotrienes receptor // EMBO J. 2006. V. 25(19). P. 4615–4627. DOI: 10.1038/sj.emboj.7601341.

УДК 577.322.63

### Структурное исследование неканонической трансаминазы из *Variovorax paradoxus*

И. О. Матюта<sup>1,2</sup>, А. Ю. Николаева<sup>1,3</sup>, Е. Ю. Безсуднова<sup>1</sup>, К. М. Бойко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт биохимии им. А. Н. Баха,

Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

В последние десятилетия в мире существует подогреваемый экологическими и экономическими стимулами устойчивый интерес к замене традиционных технологий химического синтеза на биотехнологический с участием ферментов-биокатализаторов (так называемых «green chemistry»). Поиск новых ферментов ведется в этом случае по аннотированным геномным и метагеномным данным с последующей разработкой новых биокатализаторов путем направленной модификации их характеристик. Залогом успешности такого подхода является предварительная структурно-функциональная характеристика целевых белков, позволяющая установить взаимосвязь между свойствами последних, важными для прикладных задач (температурная стабильность, субстратная специфичность и др.), и структурными мотивами, определяющими эти свойства. Трансаминазы (аминотрансферазы, ТА) представляют собой обширный класс PLP-зависимых ферментов, представители которого катализируют обратимый стереоселективный перенос аминогруппы с аминсубстрата на кетон/кетокислоту/альдегид с получением хирального амина/аминокислоты и нового кетосоединения [1]. Основная часть прикладных исследований трансаминаз направлена на разработку биокатализаторов стереоселективного аминирования аминов и синтеза неприродных D- и L-аминокислот, кетокислот, а также на разработку каскадных ферментативных процессов, включающих стадию получения оптически активных аминов. В рамках указанного выше подхода нами проводился отбор трансаминаз для целей структурно-функциональной характеристики, который позволил выявить ТА из бактерии *Variovorax paradoxus* (VP5454) с необычными мотивами активного центра. Известно, что в ТА кофактор, молекула PLP, ковалентно связывается с каталитическим остатком лизина в активном центре через основание Шиффа, образуя холоформу фермента. При этом в последовательности VP5454 каталитический лизин был заменен на аспарагин. Более того, у ряда граммотрицательных бактерий были обнаружены гены, продукты экспрессии которых аннотированы как аминотрансферазы, также содержащие аналогичную замену каталитического лизина. Для выяснения того, какие продукты кодируют эти гены, была установлена пространственная структура VP5454 с разрешением 2,3 Å [2]. Проведенный анализ структуры показал, что белок имеет типичный трансаминазный фолд и, несмотря на замену каталитического лизина, способен нековалентно связывать в активном центре PLP в конформации, напоминающей таковую в известных ТА за счет фиксации каноническими остатками активного центра.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, грант № 075-15-2021-1354.

## Литература

1. Bezsudnova E. Y., Popov V. O., Boyko K. M. Structural insight into the substrate specificity of PLP fold type IV transaminases // Appl. Microbiol. Biotechnol. 2020. V. 104(6). P. 2343–2357.
2. Boyko K. M., Matyuta I. O., Nikolaeva A. Y. [et al.]. A puzzling protein from *variovorax paradoxus* has a PLP fold type IV transaminase structure and binds plp without catalytic lysine // Basel. Crystals. 2022. V. 12(5): 619.

**Экспрессия, выделение и очистка рекомбинантного белка трансглутаминазы человека**

С. Д. Иващенко<sup>1</sup>, Н. А. Бондарев<sup>1</sup>, А. В. Власов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт ядерных исследований

Целиакия — генетически обусловленное, полигенное аутоиммунное заболевание с неменделевским механизмом наследования, вызывающее острое поражение кишечника и других систем организма в результате употребления глютена. Тканевая трансглутаминаза tTG человека — один из ключевых участников молекулярного механизма инициации аутоиммунной реакции на глютен при целиакии (рис. 1) [1]. Этот белок является одной из наиболее перспективных биологических мишеней для лечения и профилактики данного заболевания [2]. Для исследования потенциальных ингибиторов белка-мишени tTG необходимо создать систему тестов ее функциональности и активности.

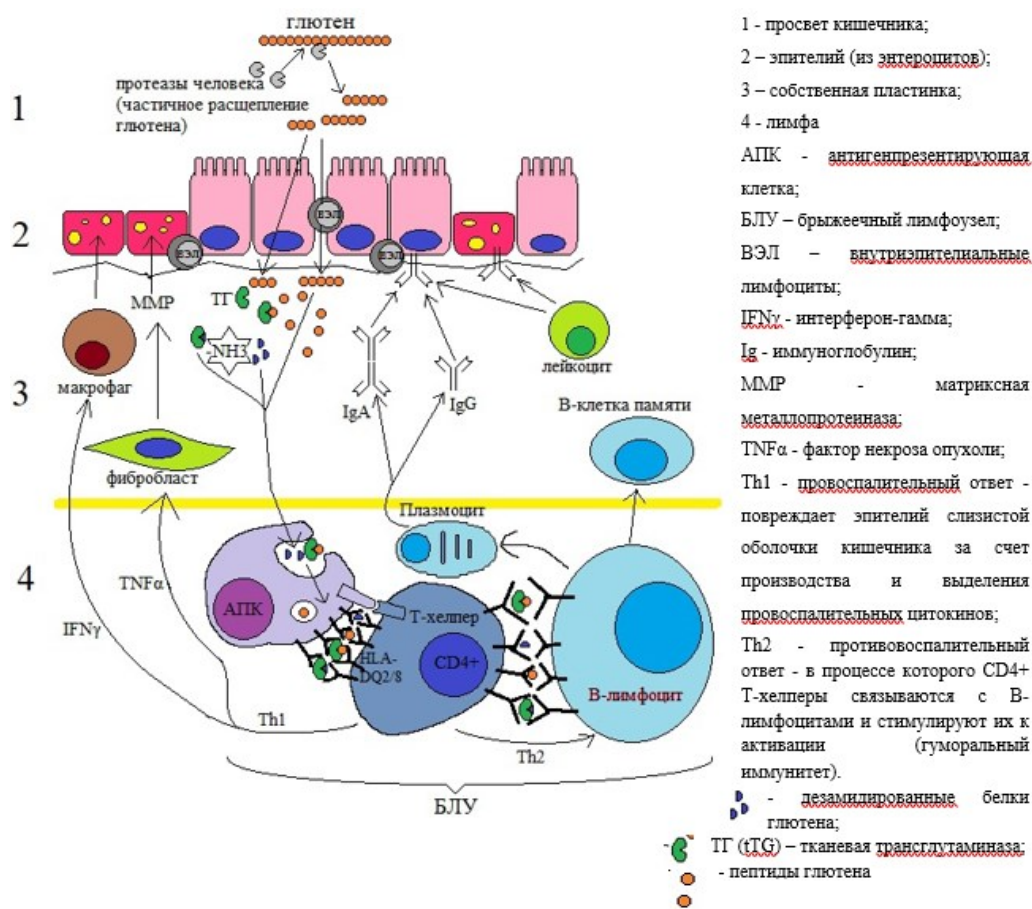


Рис. 1. Схематическое представление адаптивного иммунного ответа в лимфатической ткани кишечника и деструкции энтероцитов в механизме развития целиакии [1]

В работе исследуется тканевая трансглутаминаза tTG человека, синтезированная в клетках *Escherichia coli*. Экспрессия белка tTG была поставлена с плазмидой pHis-tTG в *E.coli* Rosetta 2 (DE3) с использованием культуральной среды Terrific-Broth [3]. Индукция транскрипции рекомбинантного белка tTG была поставлена с добавлением ИПТГ в различной концентрации (0,1 мМ, 0,5 мМ, 1 мМ), после чего клетки культивировались при различных температурах и временах инкубации. Затем белки были исследованы биохимическими методами гель-электрофореза и вестерн-блоттинга.

Определены оптимальные условия экспрессии белка tTG: 3 часа инкубации с 1 мМ ИПТГ при температуре 37°C. Подтверждена возможность экспрессии белка tTG человека в клетках *E.coli*. Обсуждается возможность определения активности tTG посредством измерения выделяемого побочного продукта — аммиака — при взаимодействии с субстратом.



## Литература

1. *Ailioaie L. M., Ailioaie C., Litscher G., Chiran D. A.* Celiac Disease and targeting the molecular mechanisms of autoimmunity in COVID pandemic // *Int. J. Mol. Sci.* 2022. V. 23(14): 7719.
2. *Singh R. S., Singh A., Batra G., Kaur H., Medhi B.* Novel targets for drug discovery in celiac disease // *Indian J. Pharmacol.* 2019. V. 51(5). P. 359–365.
3. *Han B. G., Cho J. W., Cho Y. D., Jeong K. C., Kim S. Y., Lee B. I.* Crystal structure of human transglutaminase 2 in complex with adenosine triphosphate // *Int. J. Biol. Macromol.* 2010. V. 47(2). P. 190–195.

УДК 578.287

### Исследование связывающего рецептора Эховируса 1 (штамм Farouk) с использованием нокаутной лентивирусной библиотеки GeCKO2

*О. Н. Алексеева<sup>1,2</sup>, А. В. Липатова<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>ФГБУН институт молекулярной биологии им. В. А. Энгельгардта РАН

Онколитические вирусы являются новым классом противоопухолевых препаратов [1]. Многочисленные вирусы из различных семейств продемонстрировали онколитические свойства и рассматриваются в качестве платформ для разработки онкоселективных штаммов. Среди них можно выделить энтеровирусы, являющиеся обширным семейством небольших вирусов, содержащих одноцепочечную РНК с геномом положительной полярности. Однако действие энтеровирусов на различные опухоли не является полностью предсказуемым, что усложняет их практическое использование. Поэтому поиск и проверка молекулярно-генетических детерминант чувствительности злокачественных клеток к непатогенным энтеровирусам является актуальной задачей [2–5].

Рекомбинация РНК является основной движущей силой в эволюции энтеровирусов, а также в формировании их генетической архитектуры. Подобная рекомбинация считается адаптацией для борьбы с повреждением РНК и источником генетического разнообразия. Благодаря этим свойствам получение новых штаммов энтеровирусов при помощи биоселекции является эффективным методом для повышения безопасности исходных штаммов и усиления их онколитических свойств.

Онколитический эховирус 1 (штамм Farouk, E1-F) использует неонатальный Fc-рецептор (FCGRT) для проникновения в клетки. Этот рецептор действует как фактор, инициирующий снятие вирусной оболочки, и не существует штаммов энтеровирусов вида В, способных эффективно инфицировать клетки без экспрессии этого белка [6]. Используя метод биоселекции, мы получили производный штамм от канонического E1-F на клетках HEK293T с нокаутом гена FCGRT, полученных при использовании объединенной лентивирусной нокаутной библиотеки GeCKO2. Полученный штамм может эффективно реплицироваться на клетках HEK293T ΔFCGRT.

Для понимания того, какие изменения в вирусном геноме биоселективного штамма привели к адаптации для проникновения через другой поверхностный белок и как изменилось взаимодействие нового вирусного штамма с исходным рецептором, было произведено секвенирование нового штамма. Также были получены антисыворотки к исходному и новому штаммам, и была проведена оценка нейтрализующей способности данных антисывороток.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (гранты № 20-14-00178 и № 20-75-10157).

## Литература

1. *Kaufman H. L., Kohlhapp F. J., Zloza A.* Oncolytic viruses: A new class of immunotherapy drugs // *Nat. Rev. Drug. Discov.* 2015. V. 14(9). DOI: 10.1038/nrd4663.
2. *Goetz C., Gromeier M.* Preparing an oncolytic poliovirus recombinant for clinical application against glioblastoma multiforme // *Cytokine Growth Factor Rev.* 2010. V. 21(2–3). P. 197–203. DOI: 10.1016/j.cytogfr.2010.02.005.
3. *Annels N. E., Mansfield D., Arif M.* [et al.]. Phase I trial of an ICAM-1-targeted immunotherapeutic-coxsackievirus A21 (CVA21) as an oncolytic agent against nonmuscle-invasive bladder cancer // *Clin. Cancer Res.* 2019. V. 25(19). P. 5818–5831. DOI: 10.1158/1078-0432.CCR-18-4022.
4. *Alberts P., Tilgase A., Rasa A., Bandere K., Venskus D.* The advent of oncolytic virotherapy in oncology: The Rigvir® story // *Eur. J. Pharmacol.* 2018. V. 837. P. 117–126. DOI: 10.1016/j.ejphar.2018.08.042.

5. *Shafren D. R.* Viral cell entry induced by cross-linked decay-accelerating factor // *J. Virol.* 1998. V. 72(11). P. 9407–9412. DOI: 10.1128/jvi.72.11.9407-9412.1998.
6. *Zhao X., Zhang G., Liu S.* [et al.]. Human neonatal fc receptor is the cellular uncoating receptor for enterovirus B // *Cell.* 2019. V. 177(6). P. 1553–1565. DOI: 10.1016/j.cell.2019.04.035.

УДК 577.322.9

## Экспресс-методы оценки эффективности родопсинов как оптогенетических инструментов

*А. А. Громова<sup>1</sup>, А. Д. Власова<sup>1</sup>, С. М. Бухалович<sup>1</sup>, А. Э. Михайлов<sup>1</sup>, Н. А. Бондарев<sup>1</sup>, А. В. Власов<sup>1</sup>,  
А. И. Куклин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт ядерных исследований

В основе оптогенетики лежит возможность экспрессировать на мембране клетки светочувствительные белки, как правило родопсины, с целью дальнейшего управления состоянием клетки при помощи света. При разработке оптогенетических инструментов требуется количественная оценка эффективности работы протонных помп, которая может быть выражена в виде скорости переноса протонов через мембрану клетки (для родопсинов — протонных помп). Цель данной работы — продемонстрировать подход к оценке количества протонов, переносимых одной помпой в единицу времени, в котором используется стандартная процедура экспрессии родопсина в *E. coli*, методы спектрофотометрии и рН-тесты. Таким образом, данный метод не требует процедур солиubilизации, последующей очистки и реконституции в мембрано-моделирующие среды белка. Описанный подход применен для 6 мембранных белков: трех прямых протонных помп: Arch3 из *Halorubrum sodomense*, SpaR из *Sphingomonas paucimobilis*, MAR (Marine actinobacterial clade rhodopsin) — и трех обратных: NsXeR из *Nanosalina*, BcXeR из *Bacillus coahuilensis*, PoXeR из *Parvularcula oceani*.

В ходе работы для каждого из шести исследуемых белков проведена трансформация плазмидной ДНК, кодирующей данный белок, в *E. coli*, экспрессия родопсинов в *E. coli* и подготовка клеток к дальнейшим экспериментам. С помощью спектрофотометра Shimadzu UV2450 были измерены спектры поглощения родопсина в клетках; в качестве референсного спектра взяты клетки *E. coli*, в которых экспрессия родопсина проводилась без добавления полностью-транс-ретиналя. По высоте родопсинового пика были определены концентрации белков.

Далее проводили рН-тесты: суспензия клеток *E. coli*, в мембрану которых встроены протонные помпы, освещалась лампой Olympus KL, при этом фиксировалось изменение рН суспензии (закисление среды, если встроена прямая помпа, и защелачивание — если обратная). Было проверено, что при повторении эксперимента в присутствии мембранного разобщителя CCCP изменение рН становится незначительным. Для описания зависимости рН от времени использована модель, описанная в [1, 2]. Таким образом были найдены максимальные скорости изменения концентрации протонов в клеточной суспензии при работе родопсинов.

Также были измерены значения коэффициентов экстинкции белков путем анализа кинетики реакции родопсина с гидроксилламиноном, как описано в [3]. Для этого эксперимента белки были предварительно экспрессированы в *E. coli*, выделены и очищены с помощью аффинной хроматографии и гель-фильтрации.

В результате было вычислено среднее количество протонов в единицу времени, которое переносит один белок через мембрану (табл. 1). Наибольшую эффективность из прямых протонных помп показали родопсины Arch3 и SpaR. Из обратных протонных помп наиболее эффективный — NsXeR. Родопсин Arch3 давно используется в оптогенетике. Новые родопсины SpaR и NsXeR являются перспективными инструментами для оптогенетических исследований.

Т а б л и ц а 1.

Белок	Arch3	SpaR	MAR	NsXeR	BcXeR	PoXeR
$\frac{H^+}{\text{белок} \cdot \text{мин}}$	$9,6 \pm 2,4$	$8,1 \pm 1,4$	$0,24 \pm 0,06$	$3,1 \pm 0,8$	$0,26 \pm 0,04$	$0,22 \pm 0,05$

## Литература

1. *Eroğlu İ.* [et al.]. Modelling and kinetics of light induced proton pumping of bacteriorhodopsin reconstituted liposomes // J. Membr. Sci. 1991. V. 61. P. 325–336.
2. *Bogomolni R. A.* [et al.]. Light-driven proton translocations in *Halobacterium halobium* // Biochim. Biophys. Acta Bioenerg. 1976. V. 440(1). P. 68–88.
3. *Barneschi L.* [et al.]. On the fluorescence enhancement of arch neuronal optogenetic reporters // Nat. Comm. 2022. V. 13(1): 6432.

УДК 577.322.4

## Молекулярная динамика фотодекарбоксилазы жирных кислот

*П. Е. Шишкин, А. С. Кузьмин, И. Ю. Гуцин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Солнечный свет является важнейшим источником энергии и жизни на планете. Он участвует во многих биологических процессах, преимущественно с помощью фотоактивных белков. Однако солнечный свет редко используется в качестве источника энергии для катализа химических реакций в живых организмах. На данный момент известно всего четыре типа природных фотоферментов. При этом три из них имеют ключевое значение для развития и жизни организмов, участвуя в таких процессах, как фотосинтез и репарация ДНК.

Последний из известных фотоферментов — фотодекарбоксилаза жирных кислот (ФЖК) — был открыт совсем недавно. ФЖК является специфическим для водорослей ферментом из семейства глюкозаметанол-холин оксидоредуктаз. ФЖК, выделенный из организма *Chlorella variabilis*, состоит из 654 аминокислотных остатков и содержит флавинадениндинуклеотид (ФАД) в качестве кофактора [1]. ФЖК катализирует декарбоксилирование жирных кислот с помощью механизма, основанного на радикалах [2]. В настоящее время известны кристаллографические структуры ФЖК из организма *Chlorella variabilis* с разрешением 1,78 Å, полученные при 100 К, и разрешением 1,87 Å, полученные при комнатной температуре. ФЖК имеет потенциальное применение в промышленном биокатализе, например для производства косметических средств, растворителей и биотоплива. Но на данный момент ФЖК имеет следующие недостатки: низкая субстрат-специфичность, деградация под действием света в отсутствие субстрата. Таким образом, целью работы было улучшение специфичности ФЖК к различным субстратам.

В данной работе исследование проводилось при помощи метода молекулярной динамики с использованием силового поля CHARMM36m для полноатомного моделирования, реализованного в программном пакете GROMACS. Стартовой структурой для моделирования была кристаллическая структура ФЖК из организма *Chlorella variabilis* с ФАД и двумя стеариновыми кислотами, полученная при температуре 100 К [2]. Моделирование проводилось в водной системе с добавлением противоионов NaCl. Анализ полученных траекторий показал, что конформации аминокислотных остатков и лиганда вблизи активного центра ФЖК в общем соответствуют кристаллической структуре. Также были рассмотрены водородные связи. Произведено сравнение поведения системы при различных вариантах протонирования гистидинов. Также была выполнена кластеризация конформаций интересующих аминокислот. Для визуализации и анализа траекторий использовались программы VMD, PyMOL и библиотека MDAnalysis.

## Литература

1. *Sorigué D.* [et al.]. An algal photoenzyme converts fatty acids to hydrocarbons // Science. 2017. V. 357(6354). P. 903–907. DOI: 10.1126/science.aan6349.
2. *Sorigué D.* [et al.]. Mechanism and dynamics of fatty acid photodecarboxylase // Science. 2021. V. 372(6538): eabd5687. DOI: 10.1126/science.abd5687.

## Исследование чувствительности белков-рецепторов QS систем мезофильных и психрофильных бактерий рода *Aliivibrio* к АГЛ

*Е. С. Щеглова, С. В. Баженов, И. В. Манухов*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Чувство кворума или quorum sensing (QS) — это особый тип регуляции экспрессии генов бактерий, зависящий от плотности их популяции. QS-системы включают в себя белки синтетазы низкомолекулярных сигнальных молекул, называемых аутоиндукторами (АИ), и регуляторные рецепторные белки, которые при достижении пороговой концентрации АИ в среде связываются с АИ и в таком виде управляют экспрессией генов [1]. При помощи QS-систем бактерии контролируют множество функций, включая формирование биопленок, люминесценцию, а также производство факторов вирулентности.

Наиболее распространенными сигнальными молекулами у грамотрицательных бактерий являются ацильные производные L-гомосерин лактона (АГЛ), отличающиеся друг от друга по длине ацильной цепи (от 4 до 18 CH<sub>2</sub> звеньев) и по заместителям на третьем атоме углерода. Один рецепторный белок может обладать чувствительностью к различным АИ. Так, морские мезофильные бактерии *Aliivibrio fischeri* регулируют люминесценцию при помощи AinS/AinR и LuxI/LuxR QS-систем. AinS продуцирует N-окта-ноил-гомосерина лактон (С8-ГСЛ), LuxI производит целый ряд АГЛ с длиной ацильной цепи от 4 до 10 атомов углерода, основным из которых является 3-оксо-гексаноил-L-гомосеринлактон (3ОС6-ГСЛ) [2]. Чувствительность рецепторного белка LuxR как к 3ОС6-ГСЛ, так и к С8-ГСЛ обеспечивает связь между двумя QS-системами [3]. Основным АИ LuxR является 3ОС6-ГСЛ, однако исследование методом направленной эволюции показало возможность увеличения чувствительности LuxR к С8-ГСЛ с взаимным уменьшением чувствительности к 3ОС6-ГСЛ как следствие малого количества мутаций [4].

Люминесценция психрофильных бактерий *Aliivibrio logei* также регулируется с помощью QS-системы. Данные бактерии производят по меньшей мере 9 различных АГЛ [2]. В отличие от *A. fischeri*, *A. logei* имеет два рецепторных белка LuxR1 и LuxR2. LuxR1 обладает значительно меньшей чувствительностью к 3ОС6-ГСЛ, чем LuxR2 [5]. На сегодняшний день неизвестно, чем обусловлено присутствие двух копий LuxR в клетках *A. logei*. Однако возможность изменения специфичности LuxR *A. fischeri* с помощью точечных мутаций приводит к гипотезе о различной специфичности LuxR1 и LuxR2 *A. logei* к различным АГЛ.

В настоящей работе была проверена данная гипотеза, для чего было выполнено исследование чувствительности рецепторных белков LuxI/LuxR QS-систем *A. fischeri* и *A. logei* к ряду АИ, продуцируемых *A. logei*. Для этих целей использовались сконструированные цельноклеточные lux-биосенсоры на основе *Escherichia coli* [6], в которых экспрессия генов luxCDABE *Photobacterium luminescens* индуцируется рецепторными белками LuxR *A. fischeri*, LuxR1 или LuxR2 *A. logei* в ответ на экзогенное добавление АИ.

Измерения показали, что чувствительность LuxR1 к С4-ГСЛ сопоставима с чувствительностью LuxR *A. fischeri* и на два порядка выше чувствительности LuxR2 к С4-ГСЛ. В отношении остальных протестированных АИ (3ОС4-, С6-, 3ОС6-, 3ОНС6-, С8-, 3ОС8-, 3ОС10-, 3ОНС10- ГСЛ), LuxR1 обладает чувствительностью меньшей, чем LuxR и LuxR2.

Таким образом, в работе была определена чувствительность рецепторных белков LuxR1 и LuxR2 *A. logei* ко всем АГЛ, продуцируемым *A. logei*. Полученные результаты подтверждают гипотезу о различиях в специфичности LuxR1 и LuxR2 к различным АГЛ. Ответ биосенсора на основе LuxR1 на экзогенное добавление С4-ГСЛ происходил при концентрациях от 10 мкМ С4-ГСЛ, что на 2 порядка выше концентрации, достигаемой в среде при культивации клеток *A. logei* [2]. В дальнейшем планируется проведение исследования чувствительности LuxR1 и LuxR2 к АИ непосредственно в клетках *A. logei* при температурах роста 12–16°C, характерных для данных психрофильных бактерий. Возможно, что LuxR1 значительно отличается по функциональности в клетках *E. coli* и *A. logei*.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 22-14-00124.

### Литература

1. Miller M. B. [et al.] Quorum Sensing in Bacteria // Annu. Rev. Microbiol. 2001. V. 55(1). P. 165–199.
2. Purohit A. A. [et al.] Presence of acyl-homoserine lactones in 57 members of the Vibrionaceae family // J. Appl. Microbiol. 2013. V. 115(3). P. 835–847.
3. Hansen H. [et al.] The autoinducer synthases LuxI and AinS are responsible for temperature-dependent AHL production in the fish pathogen *Aliivibrio salmonicida* // BMC Microbiol. 2015. V. 15(1): 69.

4. Colton D. M. [et al.] Modeling Analysis of Signal Sensitivity and Specificity by *Vibrio fischeri* LuxR Variants // PLOS ONE. 2015. V. 10(5): e0126474.
5. Khrulnova A. S. [et al.] Lux-operon of the marine psychrophilic bacterium *Aliivibrio logei*: A comparative analysis of the LuxR1/LuxR2 regulatory activity in *Escherichia coli* cells // Microbiology. 2016. V. 162(4). P. 717–724.
6. Bazhenov S. V. [et al.] Bacterial lux-biosensors: Constructing, applications, and prospects // Biosens. Bioelectron. X. 2023. V. 13(4): 100323.

УДК 577.22

### **Экспрессия, очистка и функциональные тесты фотодекарбоксилазы жирных кислот из *Chlorella variabilis***

**О. Ю. Семенов, Е. А. Кузнецова, И. И. Натаров, А. Э. Михайлов, А. А. Ремеева, И. Ю. Гуцин**

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В последнее время химическая индустрия и использование природных ископаемых создают высокую нагрузку на окружающую среду, угрожая ее состоянию. Одним из ответов на проблему является развитие биоэкономики, предполагающее замену ископаемых ресурсов возобновляемыми материалами, получаемыми при помощи биотехнологии. Фотобиокатализ является перспективным с этой точки зрения, так как предоставляет доступ к экологически безопасным и высокоселективным преобразованиям. На данный момент известно только четыре семейства фотоферментов [1], и недавно открытые фотодекарбоксилазы жирных кислот (ФЖК) катализируют наиболее перспективную реакцию с точки зрения применения в промышленности.

Открытая в 2017 г. ФЖК из *Chlorella variabilis* (CvFAP) продемонстрировала активность в отношении широкого спектра субстратов, однако в то же время имела низкую стабильность [2]. Поэтому были предприняты попытки как повысить стабильность фермента, так и перепрофилировать его под иные субстраты [3]. Хотя некоторые успехи были достигнуты, существует еще большой потенциал для дальнейших усовершенствований.

В данной работе были проанализированы 8 конструкций, содержащих ген ФЖК из *Chlorella variabilis* (CvFAP), с точки зрения их экспрессии и очистки для выбора наиболее оптимальной для работы. Была продемонстрирована каталитическая активность очищенного белка и исследована зависимость степени олигомеризации от условий очистки.

#### **Литература**

1. Björn L. O. Photoenzymes and related topics: an update // Photochem. Photobiol. 2018. V. 94(3). P. 459–465.
2. Wu Y. [et al.] Stabilisation of the fatty acid decarboxylase from *Chlorella variabilis* by caprylic acid // ChemBioChem. 2021. V. 22(14). P. 2420–2423.
3. Hedison T. M. [et al.] Making molecules with photodecarboxylases: A great start or a false dawn? // Curr. Res. Chem. Biol. 2022. V. 2 (12): 100017.

УДК 2788.

### **Специфичность антирестрикционного белка Ocr**

**А. А. Уткина, А. А. Кудрявцева, И. В. Манухов**

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Системы рестрикции-модификации (RM-системы) осуществляют защиту прокариотической клетки от проникающей в нее чужеродной ДНК. В ходе эволюции бактериофаги и трансмиссивные плазмиды выработали механизмы противодействия RM-системам. Один из таких механизмов — белки антирестрикции (антирестриктазы).

Объектом настоящего исследования является белок Ocr, обнаруженный в бактериофаге T7. Его антирестрикционная активность против RM I типа обусловлена структурной мимикрией молекулы ДНК. Известно, что антирестриктазы, подобные Ocr, например ArdA (работают против системы EcoKIB [1]), обладающие таким механизмом действия, активны в отношении белков рестрикции первого типа.

Настоящая работа посвящена изучению специфичности белка Ocr. Для этого была проведена оценка его антирестрикционной активности в отношении рестриктаз различных подтипов (IA, IB, IC) первого типа.

Использованные в работе плазмиды перечислены в табл. 1. Плазмида pACYC-EcoKI была получена в нашей лаборатории ранее [2]. Плазмида pBAD-Ocr была любезно предоставлена коллегами из Сколковского института науки и технологий, и pAM35 — коллегами из центра нанобиологии и структурной биологии Чешской академии наук (Centrum Nanobiologie a Strukturní Biologie Mikrobiologického Ústavu Akademie Věd České Republiky).

Т а б л и ц а 1. Плазмиды, использованные в работе для оценки активности белка Ocr в отношении рестриктазы EcoAI

Плазмида	Описание
pKF650	Вектор pACYC184, содержит ген рестриктазы EcoR124II, относящейся к семейству IC
pACYC-EcoKI	Вектор pACYC-EcoKI, кодирующий рестриктазу EcoKI, относящуюся к семейству рестриктаз IA
pAM35	Вектор pACYC184, кодирующий рестриктазу EcoAI, относящуюся к семейству рестриктаз IB
pBAD-Ocr	Вектор pBAD L24, кодирующий белок Ocr фага T7 под контролем промотора araBAD

Для выяснения спектра действия рестриктазы Ocr необходимо было получить клетки, содержащие две плазмиды: одну, несущую ген антирестриктазы, и вторую, несущую ген *ocr*. Для получения этих двойных трансформантов были использованы клетки *Escherichia coli* K-12 штамма TG1, не имеющие собственной системы рестрикции-модификации (r-m-). В качестве контроля использовались клетки *E. coli* TG1, несущие только гены рестриктаз и не имеющие белков антирестрикции. Трансформация проводилась кальциевым методом согласно методике [3]. Для оценки антирестрикционной активности белка Ocr использовалась фаговая методика [4].

Результаты исследований приведены в рис. 1 (эффективность посева фага на штамме, несущем плазмиду pAM35, принята за единицу).

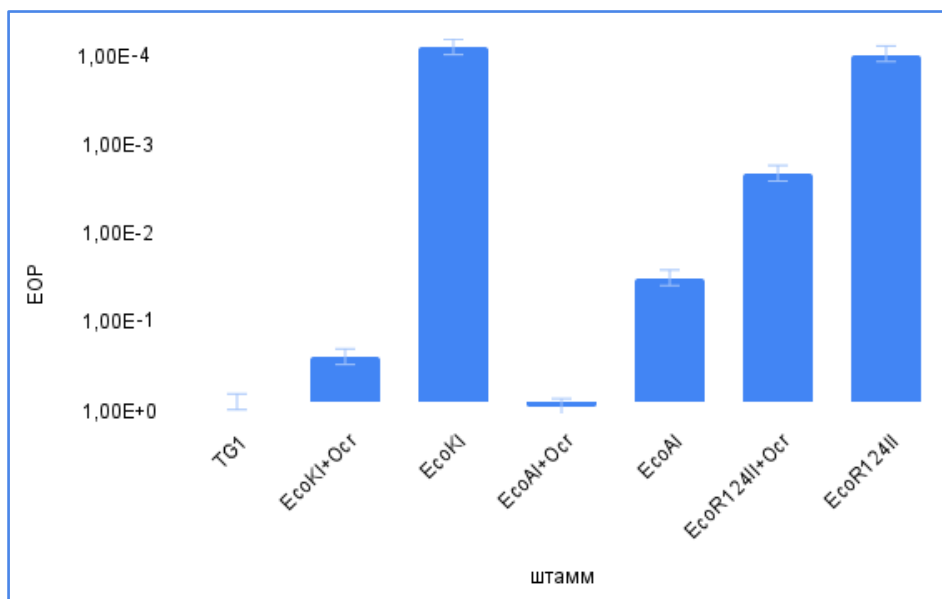


Рис. 1. Эффективность защиты, обеспечиваемой системами RM первого типа. Результаты фагового посева (EOP)  $\lambda.0$  на газон из клеток *E. coli*, содержащих гены различных систем RM граммотрицательных бактерий. Погрешность представляет собой стандартное отклонение по результатам трех независимых измерений

Исходя из результатов посева фага, было выяснено, что исследуемый белок Ocr существенно подавляет рестрикционную активность EcoKI, EcoAI и EcoR124II. Согласно полученным ранее данным, белок с аналогичным механизмом действия — ArdA — не активен против EcoAI. Таким образом, две ДНК-мимикрирующие антирестриктазы имеют разный спектр воздействия, а значит, имитируют разные участки ДНК.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 22-74-00027.

## Литература

1. *Алехин В. А.* [и др.] Изучение активности антирестрикторного белка ArdB в отношении рестриктазы EcoAI // Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 29 ноября—03 декабря 2021 г. Биологическая и медицинская физика. — М.: МФТИ, 2021. С. 109–110.
2. *Kudryavtseva A. A.* [et al.] Anti-restriction activity of ArdB protein against EcoAI endonuclease // *Mol. Biol.* 2023. V. 57(1). P. 101–104.
3. *Маниатис Т., Фрич Э., Сэмбрук Дж.* Молекулярное клонирование. — М.: Мир, 1984.
4. *Zavil'gel'skiĭ G. B.* [et al.]. Weakening of bacteriophage lambda EcoK DNA restriction in the presence of plasmid pKM101 ard<sup>+</sup>. I. General characteristics and genetic localization // *Mol. Biol. (Mosk)*. 1984. V. 18(6). P. 1590–1596.

УДК 577.352.333

### Структура и динамика латеральной гетерогенности бислоев ДОФХ/ДОФС: результаты компьютерного моделирования

*И. И. Веретененко<sup>1,2</sup>, Ю. А. Трофимов<sup>1,3</sup>, Р. Г. Ефремов<sup>1,2,4</sup>*

<sup>1</sup> Институт биоорганической химии им. акад. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН

<sup>2</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup> Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

<sup>4</sup> Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Латеральной гетерогенностью биологических мембран называется неоднородное динамическое распределение липидов в плоскости бислоя, проявляющееся, в частности, на масштабах порядка  $10\div 100$  Å (так называемые «нанодомены»). Известно, что латеральная гетерогенность влияет на структуру, динамику и функционирование клеточных мембран, например, регулируя работу мембранных белков [1, 2]. Однако, несмотря на появление методов сверхвысокого разрешения, экспериментальное исследование нанодоменов остается сложной задачей из-за их небольшого размера и малого времени жизни [3]. Поэтому их часто изучают вычислительными методами.

В настоящей работе методом молекулярной динамики (МД) исследовали нанодомены в бислоях, состоящих из смеси цвиттерионного диолеилфосфатидилхолина (ДОФХ) и отрицательно заряженного диолеилфосфатидилсерина (ДОФС). Моделирование проводили в программном пакете Gromacs [4], в полноатомном силовом поле Charmm36 [5]. Длина МД-траектории для каждой системы составляла 400 нс. Для анализа результатов использовали программную среду Impulse [6] и язык программирования Python.

Для характеристики латеральной гетерогенности предложен метод разделения липидов на «кластеризованные» и «некластеризованные» в зависимости от наличия или отсутствия в окрестности центров масс липидных головок избыточной плотности атомов других липидов. Далее кластеризованные головки, расположенные на расстоянии менее 8,1 Å для ДОФХ и 7,3 Å для ДОФС, были объединены в группы — так называемые «кластеры».

Показано, что структура и динамика выявленных кластеров значительно отличаются для ДОФХ и ДОФС: кластеры ДОФС характеризуются меньшим средним размером (8 липидов ДОФХ и 6 для ДОФС) и большим временем жизни ( $\tau \approx 2,6$  нс) по сравнению с ДОФХ ( $\tau \approx 0,7$  нс). Кроме того, характер кластеризации ДОФХ похож на кластеры в системе, сгенерированной случайным образом из того же числа липидов в бислое, т. е. без учета молекулярных взаимодействий.

Наблюдаемые различия в характере латеральной гетерогенности объясняются наличием у ДОФС большего числа липид-липидных взаимодействий (водородных связей липид–липид и связей липид–ион–липид), образующихся преимущественно между кластеризованными липидами. Кроме того, данный эффект является причиной возникновения более выраженной неоднородности в распределении гидрофильных/гидрофобных свойств поверхности мембраны ДОФС по сравнению с ДОФХ. Полученные результаты могут быть использованы при изучении молекулярных механизмов функционирования различных мембранных систем, в частности мембранных белков, а также предполагают дальнейшее развитие с включением большего числа компонент в модельные системы.

## Литература

1. *Van Meer G., Voelker D. R., Feigenson G. W.* Membrane lipids: where they are and how they behave // *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.* 2008. V. 9(2). P. 112–124. DOI: 10.1038/nrm2330.

2. Pike L. J. Rafts defined: a report on the Keystone symposium on lipid rafts and cell function // J. Lipid Res. 2006. V. 47(7). P. 1597–1598. DOI: 10.1194/jlr.e600002-jlr200.
3. Sezgin E., Levental I., Mayor S., Eggeling C. The mystery of membrane organization: composition, regulation and roles of lipid rafts // Nat. Rev. Mol. Cell Biol. 2017. V. 18(6). P. 361–374. DOI: 10.1038/nrm.2017.16.
4. Abraham M. J. [et al.]. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers // SoftwareX. 2015. V. 1–2. P. 19–25. DOI: 10.1016/j.softx.2015.06.001.
5. Mackerell A. D. Jr., Feig M., Brooks C. L. III. Extending the treatment of backbone energetics in protein force fields: Limitations of gas-phase quantum mechanics in reproducing protein conformational distributions in molecular dynamics simulations // J. Comput. Chem. 2004. V. 25(11). P. 1400–1415. DOI: 10.1002/jcc.20065.
6. Krylov N. A., Efremov R. G. libxtc: an efficient library for reading XTC-compressed MD trajectory data // BMC Res. Notes. 2021. V. 14(1): 124. DOI: 10.1186/s13104-021-05536-5.

УДК 577.352.53

## Функциональные и спектральные свойства ксенородопсина с уникальной группой высвобождения протона

Д. В. Дорогинин, А. А. Алексеев, Ф. М. Цыбров

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Поиск перспективных светочувствительных белков и их исследование является важной частью улучшения инструментария оптогенетических методов. Оптогенетика — биотехнология, позволяющая управлять состоянием клетки при помощи света. Такая возможность обеспечивается использованием светочувствительных белков в изначально несветочувствительных клетках. Оптогенетика стала распространенным инструментом для исследования электрически активных клеток, в первую очередь нейронов [1]. Помимо этого оптогенетические инструменты используются для регуляции активности белков в клетке [2], также на их основе разработаны слуховые импланты и искусственная сетчатка глаза [3, 4].

Ксенородопсины — это светочувствительные микробные трансмембранные белки, которые при поглощении фотона прокачивают внутрь клетки протон. Ксенородопсины являются перспективными кандидатами для управления нейрональной активностью и на данный момент являются единственной альтернативой катионным каналам в качестве активаторов потенциала действия. В то же время они не имеют минусов, ассоциируемых с катионными каналами: работа ксенородопсинов не влияет напрямую на концентрацию ионов натрия, калия и хлора, а их функциональность не зависит от мембранного потенциала, в отличие от ионных каналов, обладающих потенциалом реверсии, при котором фототок через канал не идет.

Для данной работы было выбрано семейство ксенородопсинов, отличающееся от ранее исследованных (*NsXeR*, *PoXeR* и *RmXeR* [5–7]) в ряде структурно важных участков. В частности, в группе высвобождения протона: финальной группе, в которую протон переходит и далее высвобождается в цитоплазму клетки, а именно, структурный мотив ETD, присущий всем известным бактериальным ксенородопсином, заменен на KTN. Целью работы было провести функциональную и спектральную характеристику белка — представителя этого семейства, далее названного *LxXeR*.

Для начала белок был экспрессирован в *E. coli*. Были проведены измерения изменения pH в суспензии клеток, взвешенных в солевом растворе, под действием света. В ходе экспериментов было доказано, что *LxXeR* также прокачивает протон внутрь клетки. Интересной особенностью функционирования белка является то, что в растворе NaCl эффект в среднем значительно меньше, чем в растворе KCl.

Рекомбинантный белок *LxXeR* был экспрессирован с помощью системы *E. coli*, выделен и очищен. Методом фоторазрешенной спектrophотометрии для очищенного белка были проведены эксперименты по измерению фотоциклов, являющихся важной характеристикой для родопсинов. Фотоциклы *LxXeR* соответствуют фотоциклам других ксенородопсинов.

Дальнейшие исследования данного белка предполагают решение структуры белка и последующее определение структурного механизма функционирования, а также подробное исследование его электрофизиологических и спектральных характеристик.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-64-00018.



## Литература

1. Kim C., Adhikari A., Deisseroth K. Integration of optogenetics with complementary methodologies in systems neuroscience // Nat. Rev. Neurosci. 2017. V. 18. P. 222–235.
2. Manoilo K. Y., Verkhusha V. V., Shcherbakova D. M. A guide to the optogenetic regulation of endogenous molecules // Nat. Methods. 2021. V. 18. P. 1027–1037.
3. Jeschke M., Moser T. Considering optogenetic stimulation for cochlear implants // Hear. Res. 2015. V. 322. P. 224–234.
4. Saeedi P. [et al.]. Potential applications of bacteriorhodopsin mutants // Bioengineered. 2012. V. 3. P. 326–328.
5. Shevchenko V., Mager T., Kovalev K. [et al.]. Inward H<sup>+</sup> pump xenorhodopsin: Mechanism and alternative optogenetic approach // Sci. Adv. 2017. V. 3(9): e1603187.
6. Inoue S. Spectroscopic characteristics of Rubricoccus marinus xenorhodopsin (RmXeR) and a putative model for its inward H<sup>+</sup> transport mechanism // Phys. Chem. Chem. Phys. 2018. V. 20(5). P. 3172–3183.
7. Inoue K., Ito S., Kato Y. [et al.]. A natural light-driven inward proton pump // Nat. Commun. 2016. V. 7: 13415.

УДК 577.322.63

## Получение криоэлектронной структуры ретинального белка со связанным каротиноидом

**С. С. Баранова<sup>1</sup>, А. И. Гуськов<sup>1</sup>, Е. Г. Максимов<sup>2</sup>, И. А. Ярошевич<sup>2</sup>, А. В. Богачев<sup>2</sup>, В. И. Борщевский<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Родопсины представляют собой светочувствительные мембранные белки, которые в своей работе для поглощения света используют молекулу ретиналя, ковалентно связанную с молекулой белка [1]. Некоторые родопсины помимо ретиналя для поглощения света используют молекулу каротиноида в качестве дополнительной антенны [2]. Атомарная структура белка со связанным каротиноидом представляет интерес как для понимания принципов передачи энергии между фоточувствительными молекулами, так и имеет потенциальную прикладную важность для развития оптогенетики.

Данная работа посвящена получению структуры мембранного ретинального белка со связанным каротиноидом методом криоэлектронной микроскопии. В докладе обсуждаются основные этапы обработки данных и их влияние на качество карт плотности. Полученная в итоге работы структура имеет разрешение лучше 3 Å и позволяет установить атомарные детали взаимодействия каротиноида с белковой молекулой.

## Литература

1. Anashkin V. A., Bertsova Y. V., Mamedov A. M. [et al.]. Engineering a carotenoid-binding site in *Dokdonia* sp. PRO<sub>95</sub> Na<sup>+</sup>-translocating rhodopsin by a single amino acid substitution // Photosynth. Res. 2018. V. 136. P. 161–169. DOI: 10.1007/s11120-017-0453-0.
2. Chazan A., Das I., Fujiwara T. [et al.]. Phototrophy by antenna-containing rhodopsin pumps in aquatic environments // Nature. 2023. V. 615. P. 535–540. DOI: 10.1038/s41586-023-05774-6.

УДК 577.322

## Влияние высокого давления благородных газов на закристаллизованный аденозиновый A<sub>2A</sub>-рецептор человека

**В. А. Поспелов, В. И. Борщевский, А. В. Мишин, Т. В. Котова, М. Б. Шевцов**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Мембранные белки представляют из себя белковые молекулы, закрепленные в мембранах клеток или клеточных органелл. Они выполняют рецепторную, транспортную и сигнальную функции, являющиеся ключевыми для функционирования многоклеточного организма на молекулярном уровне. Длина кодирующей их последовательности суммарно составляет ~23% от всего протеома человека [1]. Поэтому они являются одной из важнейших целей для исследований.

Уникальные возможности для современной фармакологии представляют рецепторы, сопряженные с G-белком — подкласс мембранных белков. Находясь на поверхности клетки и регулируя множество сигнальных катаболических путей, представители этого класса являются мишенями для более чем 60% современных лекарственных препаратов [2]. Тем не менее из более чем 200 000 полученных структур, размещенных в RSCB PDB, только 2% относятся к мембранным белкам. Основным методом для получения качественных структур белков на сегодняшний день является белковая рентгеновская кристаллография: вначале получают кристаллы белка надлежащего качества, в случае с мембранными белками кристаллизация происходит в липидной кубической фазе [3]; затем на источниках синхротронного излучения последнего поколения проводится эксперимент по монокристалльной дифракции. С помощью данного метода получено более 85% всех белковых структур.

Недавние работы методами ЯМР показали, что  $\beta_1$ -адренорецептор, относящийся к классу рецепторов, сопряженных с G-белком, при высоком давлении переходит в активное состояние [4]. В данной работе исследовано изменение конформации закристаллизованного мембранного белка при высоком давлении в атмосферах гелия и криптона методом макромолекулярной кристаллографии. Дифракционные эксперименты были проведены на длинах волн аномального рассеяния, что позволило извлечь дополнительную информацию о локализации атомов газа. В качестве исследуемого объекта был взят аденозиновый  $A_{2A}$ -рецептор человека.

### Литература

1. *Uhlén M.* [et al.]. Tissue-based map of the human proteome // *Science*. 2015. V. 347(6220): 1260419.
2. *Lahti J. L.* [et al.]. Bioinformatics and variability in drug response: a protein structural perspective // *J. R. Soc. Interface*. 2012. V. 9(72). P. 1409–1437.
3. *Landau E. M., Rosenbusch J. P.* Lipidic cubic phases: a novel concept for the crystallization of membrane proteins // *PBAS*. 1996. V. 93(25). P. 14532–14535.
4. *Abiko L. A., Grahl A., Grzesiek S.* High pressure shifts the  $\beta_1$ -adrenergic receptor to the active conformation in the absence of G protein // *J. Am. Chem. Soc.* 2019. V. 141(42). P. 16663–16670.

УДК 577.322

### Применение методов машинного обучения в виртуальном скрининге

**М. И. Ковалева<sup>1</sup>, Е. В. Марьин<sup>1</sup>, М. Н. Кадукова<sup>2,3</sup>, Х. С. Мустафин<sup>1</sup>, А. В. Розачев<sup>1</sup>, А. В. Мишин<sup>1</sup>,  
В. И. Борщевский<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Университет Гренобль-Альпы, Национальный центр научных исследований,  
Политехнический институт Гренобля, Гренобль, Франция

<sup>3</sup>Astex Pharmaceuticals, Кембридж, Великобритания

Виртуальный скрининг — это вычислительный метод, применяющийся для поиска малых молекул, обладающих активностью против определенной мишени, в большой библиотеке малых молекул. Метод основан на молекулярном докинге — вычислительно сложном алгоритме, и использует библиотеки соединений, размер которых постоянно растет. Это обстоятельство приводит к значительным вычислительным затратам на этапе виртуального скрининга. Методы машинного обучения позволяют ускорить данный этап: например, по результатам докинга небольшого подмножества молекул можно предсказать молекулы с наилучшим скором молекулярного докинга, и только это подмножество будет отправлено на следующий шаг скрининга. Такой подход называется ускоренным виртуальным скринингом.

В данной работе был построен итеративный алгоритм предсказания наиболее перспективных соединений. Его эффективность была протестирована на структурах аденозинового ( $A_{2A}$ AR) и каннабиноидного (CB2) рецепторов, докинг которых был выполнен в программе ICM-Pro, а также на результатах скрининга AmpC бета-лактамазы и рецептора D4 в программе DOCK, опубликованных ранее [1]. На основе линейных моделей был построен итеративный алгоритм, на каждом шаге которого выполнялись обучение модели, предсказание сора докинга, составление рейтинга соединений и докинг лучшего 1% соединений из рейтинга. Исследовалась эффективность алгоритма в зависимости от используемой в нем модели машинного обучения и от метода построения рейтинга. Построенный алгоритм сравнивался с полным виртуальным скринингом по времени работы и доле найденных «хитов» скрининга.

Т а б л и ц а 1. Процент найденных хитов в зависимости от желаемого ускорения виртуального скрининга

Датасет	10х ускорение	3х ускорение
A <sub>2</sub> AR, ICM-Pro	51 ± 3 %	85 ± 1 %
CB2, ICM-Pro	48 ± 3 %	80.3 ± 0.4 %
AmpC, Dock	91.3 ± 0.4 %	97.5 ± 0.1%
D4, Dock	60 ± 1 %	87.6 ± 0.3 %

Результаты работы итеративного алгоритма сильно зависели от мишени виртуального скрининга и того, как проводился молекулярный докинг (табл. 1). При этом независимо от конкретного случая удалось добиться кратного ускорения виртуального скрининга при экстракции значительного процента хитов. Построенный алгоритм может ускорять молекулярный докинг в 10 раз, при этом сохраняя 60% молекул с наилучшим скором, или в 4 раза, сохраняя около 80%. Такие результаты сравнимы с результатами ранее представленных методов ([2–4]). Данный подход позволяет проводить масштабный виртуальный скрининг с доступными вычислительными ресурсами за адекватное время.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 22–24–00454.

### Литература

1. *Lyu J., Wang S., Balias T. E.* [et al.] Ultra-large library docking for discovering new chemotypes // *Nature*. 2019. V. 566. P. 224–229. DOI: 10.1038/s41586-019-0917-9.
2. *Gentile F., Agrawal V., Hsing M.* [et al.]. Deep docking: a deep learning platform for augmentation of structure based drug discovery // *ACS Cent. Sci.* 2020. V. 6(6). С. 939–949. DOI: 10.1021/acscentsci.0c00229.
3. *Yang Y., Yao K., Repasky M.* [et al.]. Efficient exploration of chemical space with docking and deep-learning // *ChemRxiv preprint*, 2021. DOI: 10.26434/chemrxiv.14153819.v1.
4. *Berenger F., Kumar A., Zhang K. Y. J., Yamanishi Y.* Lean-docking: exploiting ligands' predicted docking scores to accelerate molecular docking // *J. Chem. Inf. Model.* 2021. V. 61(5). DOI: 10.1021/acs.jcim.0c01452.

УДК 577.112.5

## Природное разнообразие бактериальных сенсоров калия KdpD

*М. В. Молчанова*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Одной из разновидностей белков в бактериях являются сенсорные белки, функция которых состоит в распознавании сигналов и передаче информации внутрь клетки. В частности, к таким белкам относятся сенсоры калия KdpD. Общей целью работы является изучение природного разнообразия сенсоров KdpD в бактериях. Здесь представлен один из этапов: отбор белков с близкой к KdpD *Escherichia coli* архитектурой.

Белок KdpD *Escherichia coli* (идентификатор P21865 в InterPro [1]) имеет следующую архитектуру:

IPR003852 — IPR025201 — IPR003018 — IPR003661 — IPR003594.

С использованием предоставляемого API из базы данных InterPro отобраны похожие белки, содержащие хотя бы один из первых двух доменов: IPR003852 или IPR025201, всего 26674 белков. Извлечена информация об этих белках (последовательность, таксономия, проаннотированные домены). Поскольку InterPro не предоставляет API для получения архитектуры, была разработана процедура ее определения на основе полученных данных. На нескольких примерах (более 10) сделано сравнение с архитектурой web-сервиса InterPro. Во всех случаях результаты совпали.

Для каждого белка была определена архитектура. Общее число различных архитектур составило 894. Семь наиболее часто встречающихся архитектур приведены в табл. 1.

Уже из этой выборки видно, что есть очень похожие архитектуры, отличающиеся только одним доменом. Например, архитектура под номером 4 отличается от архитектуры 6 только отсутствием домена IPR006016. Возникает вопрос, насколько хорошо выполнено аннотирование доменов в InterPro и как это проверить.

Относительно недавно появился новый способ проверки. Программа AlphaFold версии 2 [2] делает предсказание пространственной структуры белка. Проверка заключается в визуальном сравнении

структур белков с близкой архитектурой. Для большинства отобранных белков предсказания структуры уже сделаны, а соответствующие файлы находятся в свободном доступе.

Таблица 1.

№	Количество белков	Архитектура
1	5232	IPR003852 — IPR006016 — IPR025201 — IPR003661 — PF02518
2	3775	IPR025201 — IPR003661 — PF02518
3	3031	IPR003852 — IPR025201 — IPR003661 — PF02518
4	2471	IPR003852 — IPR025201 — PF13492 — IPR003661 — PF02518
5	2069	IPR003852
6	1774	IPR003852 — IPR006016 — IPR025201 — PF13492 — IPR003661 — PF02518
7	1258	IPR003852 — IPR006016

Для сравнения из группы белков, имеющих архитектуру 4, случайным образом были выбраны несколько десятков белков и, если имелись, скачаны файлы со структурой. Визуализация проводилась с помощью программы PyMOL [3]. Пример сравнения двух белков с архитектурами 6 и 4 приведен на рис. 1. Структуры обоих белков между доменами IPR003852 и IPR025201 похожи, что свидетельствует о вероятной ошибке аннотирования в InterPro. В итоге оказалось, что в значительном количестве случаев предсказанная AlphaFold структура не соответствует аннотированной в InterPro. В то же время предсказания AlphaFold похожи. Таким образом, можно сделать вывод, что в InterPro процедура аннотирования далека от совершенства, а к получаемым с ее использованием результатам нужно относиться с осторожностью.

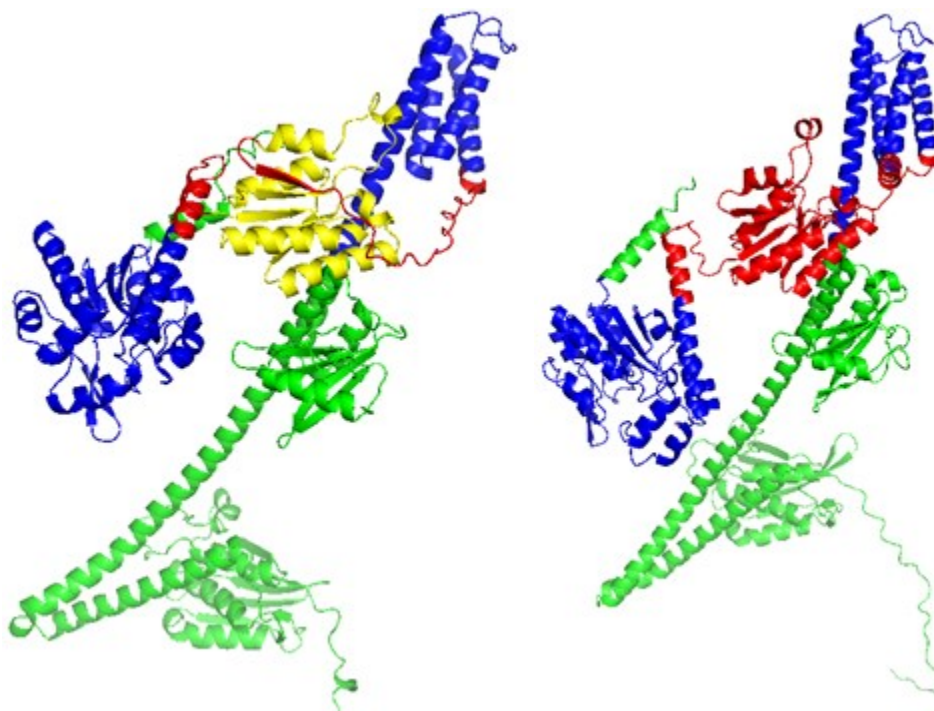


Рис. 1. Пример сравнения моделей структур белков, родственных KdpD, для архитектур, отличающихся одним аннотированным доменом: *слева* — белок A0A060I5I2; *справа* — белок A0A118G649. Выделены области: синим — домены IPR003852 и IPR025201, желтым — домен IPR006016, красным — не аннотированный промежуток, зеленым — остальная часть белка.

### Литература

1. Blum M., Chang H.-Y., Chuguransky S. [et al.]. The InterPro protein families and domains database: 20 years on// Nucleic Acids Res. 2021. V. 49(D1): D344–D354. DOI: 10.1093/nar/gkaa977.
2. Jumper J., Evans R., Pritzel A. [et al.]. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold// Nature. 2021, V. 596. P. 583–589. DOI: 10.1038/s41586-021-03819-2.
3. The PyMOL Molecular Graphics System/ Shrodinger, LLC [электронный портал]. — URL: <https://pymol.org/>.

## Структурное исследование полноразмерного белка E SARS-CoV-2 и его доменов

*Е. А. Кузнецова, В. В. Назаренко, А. А. Ремеева, Ю. Л. Рижиков, И. Ю. Гуцин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Несколько лет назад во всем мире вспыхнула пандемия COVID-19, вызванная коронавирусом тяжелого острого респираторного синдрома 2 (SARS-CoV-2), который приводит к опасной для жизни форме атипичной пневмонии. Структурные исследования SARS-CoV-2 и его белков играют огромную роль в изучении молекулярных механизмов заражения, патогенности вируса и, как следствие, возможных способов борьбы с ним.

РНК-геном вируса SARS-CoV-2, как и других коронавирусов, кодирует несколько мембранных белков, один из которых — белок оболочки E. Белок E принимает участие в сборке вируса, взаимодействует с внутриклеточными белками и иными структурными белками SARS-CoV-2, работает как ионный канал, а делеция гена, кодирующего его, резко снижает вирусную активность [1–3]. Несмотря на важность белка E для патогенеза SARS-CoV-2, полноразмерная структура для него все еще не была получена.

На основе предыдущих исследований известно, что белок E SARS-CoV-2 представляет собой виropорин длиной 75 аминокислот, который состоит из гидрофобного  $\alpha$ -спирального трансмембранного домена (TMD) и амфифильных  $\alpha$ -спиралей H2 и H3, соединенных гибкими линкерами. Важно отметить, что его последовательность на 95% идентична белку E SARS-CoV, а их трансмембранные домены, ответственные за активность ионного канала, имеют идентичные аминокислотные последовательности [2, 4]. Поэтому выводы о структуре и функциях белка E SARS-CoV, вероятно, применимы и к SARS-CoV-2. Немногочисленные структурные исследования показали, что в мембране белок собирается в гомопентамер и образует катион-селективный канал. Выводы сделаны на основе моделирования молекулярной динамики [6] и подтверждены только с помощью твердотельной ЯМР спектроскопии для белка E SARS-CoV в липидных мицеллах [5], а также для трансмембранного домена E SARS-CoV2 в липидных бислоях [4]. Таким образом, получение структуры белка E является очень актуальной задачей.

Для ее решения были созданы генетические конструкции, кодирующие как полноразмерный белок E SARS-CoV-2, так и его отдельные домены, все конструкции были дополнены последовательностью, кодирующей флуоресцентный белок mCherry для визуализации поведения исследуемых белков на всех этапах производства и очистки. По результатам хроматографии (SEC) и DLS-экспериментов были отобраны образцы для исследования с помощью метода малоуглового рентгеновского рассеяния (SAXS), которое показало, что модель пентамера наилучшим образом описывает полученные результаты для комплексов TMD с mCherry в растворе. В будущем мы планируем сделать кристаллизацию белка E в LCP и использовать метод рентгеноструктурного анализа для определения его структуры. Либо, если возникнут трудности с получением кристаллов высокого качества, определить структуру с помощью криоэлектронной микроскопии.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (номер темы FSMG-2021-0002, соглашение 075-03-2023-106).

### Литература

1. *Cao Y., Yang R., Wang W.* [et al]. Computational study of the ion and water permeation and transport mechanisms of the SARS-CoV-2 pentameric E protein channel // *Front. Mol. Biosci.* 2020. V. 7: 565797. DOI: 10.3389/fmolb.2020.565797.
2. *Mandala V. S., McKay M. J., Shcherbakov A. A.* [et al]. Structure and drug binding of the SARS-CoV-2 envelope protein transmembrane domain in lipid bilayers // *Nat. Struct. Mol. Biol.* 2020. V. 27(12). P. 1202–1208. DOI: 10.1038/s41594-020-00536-8.
3. *Yang Y., Peng F., Wang R.* [et al]. The deadly coronaviruses: the 2003 SARS pandemic and the 2020 novel coronavirus epidemic in China // *J. Autoimmun.* 2020. V. 109: 102434. DOI: 10.1016/j.jaut.2020.102434.
4. *Sarkar M., Saha S.* Structural insight into the role of novel SARSCoV-2 E protein: a potential target for vaccine development and other therapeutic strategies // *PLoS One.* 2020. V. 15(8): e0237300. DOI: 10.1371/journal.pone.0237300.
5. *Surya W., Li Y., Torres J.* Structural model of the SARS coronavirus E channel in LMPG micelles // *Biochim. Biophys. Acta.* 2018. V. 1860. P. 1309–1317.
6. *Torres J.* [et al]. The transmembrane oligomers of coronavirus protein // *E. Biophys J.* 2005. V. 88(2)/ P. 1283–1290. DOI: 10.1529/biophysj.104.051730.

## Изучение возможностей расширения водных каналов липидных мезофаз в зависимости от способа их приготовления

*А. Ю. Шишкин<sup>1</sup>, Е. А. Дронова<sup>1</sup>, А. О. Богородский<sup>1</sup>, А. Э. Михайлов<sup>1</sup>, А. С. Казанцев<sup>1</sup>, Д. Д. Куклина<sup>1</sup>,  
Ю. С. Семенов<sup>1</sup>, Е. В. Зиновьев<sup>1</sup>, А. В. Власов<sup>1,2</sup>, А. И. Куклин<sup>1,2</sup>, Ю. Л. Рижиков<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт ядерных исследований

Получение структур мембранных белков (МБ) является необходимым элементом изучения механизмов многих важных клеточных процессов. Основным методом нахождения структуры белков на данный момент служит кристаллизация с последующими дифракционными измерениями. Одним из лучших способов получения кристаллов МБ является их кристаллизация в липидных кубических фазах (LCP). Вследствие ограниченных размеров водных каналов в LCP данный метод затруднительно использовать для МБ с водорастворимой частью длиной более 50 Å. В работе [1] был предложен способ увеличения диаметра водного канала липидных мезофаз путем электростатического расширения, однако в условиях кристаллизации эффект ослабевает из-за высоких концентраций ионов. Данный метод был успешно применен лишь для кристаллизации одного белка, его использование для других МБ с большой водорастворимой частью не дали положительных результатов. Также с использованием малых амфифильных молекул удалось получить липидные мезофазы с диаметрами водных каналов от 50 до 90 Å и закристаллизовать в данных условиях мембранный белок LH2 [2].

Более перспективным методом расширения LCP является добавление полимерного детергента с двумя крупными гидрофильными концами (2–5 кДа). Ранее было показано, что данный подход позволяет получать диаметры водного канала до 169 Å [3, 4]. В данной работе были исследованы возможности увеличения диаметра водного канала липидных фаз в зависимости от технологии и порядка смешивания компонентов. Сравнивались варианты смешивания с использованием хлороформа и без него, а также способы добавления воды: с помощью шприцевого липидного смесителя (состоит из двух соединенных между собой шприцев на 100 мкл) [5] и с помощью центрифуги. Смешивание с помощью центрифуги производилось в ПЦР-пробирках с помощью последовательного центрифугирования в течение 5 минут на оборотах, соответствующих 5000, 6000, 7000, 8000, 9000 и 10000 g, между которыми производился поворот пробирки относительно ротора на 90°.

Типы образовавшихся LCP и параметры соответствующих кристаллических решеток определялись с помощью измерений на установке малоуглового рентгеновского рассеяния Rigaku MicroMax-007 HF [6] (МФТИ) и дальнейшего анализа полученных наборов дифракционных пиков.

Обнаружено, что разведение водой в пробирке с помощью центрифуги дает смесь двух типов LCP: обычную и расширенную. В данном случае были достигнуты ранее не наблюдавшиеся значения диаметра водного канала, превосходящие 190 Å (рис. 1). Добавление же воды в шприцах дает только одну LCP с более слабым расширением (диаметр водного канала менее 90 Å).

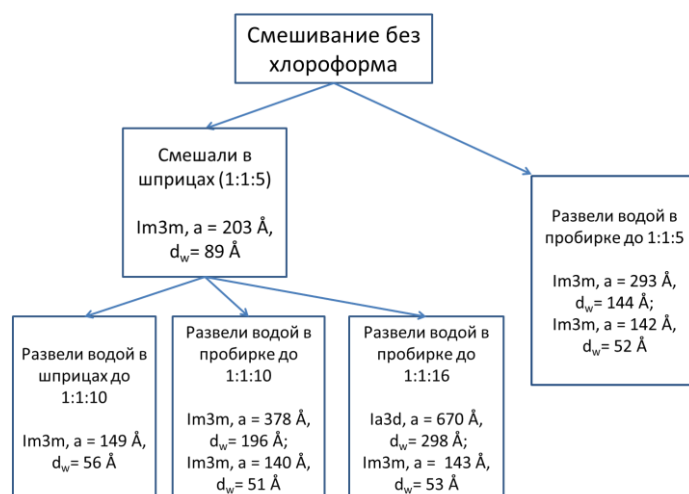


Рис. 1. Схема эксперимента для варианта смешивания без хлороформа. Для каждой из полученных смесей указаны соотношения липид : полимер : вода, типы симметрии LCP, соответствующие параметры кубической решетки ( $a$ ) и диаметры водного канала ( $d_w$ )

Также установлено, что использование хлороформа для смешивания липида с полимером приводит к возникновению гексагональной фазы P6/m с параметром решетки в диапазоне 50–60 Å вне зависимости от способа добавления воды. Хотя ожидалось, что данный подход приведет к улучшению взаимопроникновения липида и полимера и, как следствие, к более сильному расширению LCP, результат оказался отрицательным.

Работа выполнена при поддержке ФНТП Минобрнауки России по развитию синхротронных и нейтронных исследований (соглашение 075-15-2021-1354 от 07 октября 2021 г.).

### Литература

1. Zabara A. [et al.]. Design of ultra-swollen lipidic mesophases for the crystallization of membrane proteins with large extracellular domains // Nat. Commun. 2018. V. 9(1): 544. DOI: 10.1038/s41467-018-02996-5.
2. Cherezov V. [et al.]. Room to move: crystallizing membrane proteins in swollen lipidic mesophases // J. Mol. Biol. 2006. V. 357. P. 1605–1618. DOI: 10.1016/j.jmb.2006.01.049.
3. Казанцев А. С. [и др.]. Исследования возможностей увеличения водных каналов липидных кубических фаз // Труды 62-й Всероссийской научной конференции МФТИ. Фундаментальная и прикладная физика. — М.: МФТИ, 2019. С. 124–125.
4. Zinovev E. Crystallography of membrane proteins — new approaches: diss. ... dokt. Naturwissenschaften. RWTH Aachen University, 2022. URL: <https://publications.rwth-aachen.de/record/848378/files/848378.pdf> (дата обращения 15.03.2023).
5. Syringe Lipid Mixer // USC, Cherezov lab. URL: [https://cherezov.usc.edu/tools\\_slm.htm](https://cherezov.usc.edu/tools_slm.htm) (дата обращения 15.03.2023).
6. Murugova T. N. [et al.]. Low resolution structural studies of apoferritin via SANS and SAXS: The effect of concentration // J. Optoelectron. Adv. Mater. 2015. V. 17(9–10). P. 1397–1402.

УДК 577.345

## Спектральная настройка ксенородопсина VcXeR

А. А. Привалов, А. А. Алексеев, Ф. М. Цыбров

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Микробные родопсины составляют большую группу среди светочувствительных белков и встречаются во всех доменах жизни [1, 2]. Эти белки состоят из семи трансмембранных альфа-спиралей и ковалентно связанного кофактора ретиналя. При поглощении фотонов видимой части спектра ретиналь изомеризуется, иницируя функцию белка. Несмотря на то, что это свойство присуще всем родопсином, их функции разнообразны: протонные и ионные помпы, ионные каналы, сенсоры, ферменты [3]. Открытие канальных родопсинов привело к бурному развитию оптогенетики, которая произвела революцию в нейронауках [4] и может стать основой для эффективной генетической терапии восстановления зрения [5], слуха [6]. Для успешного использования оптогенетики в биомедицинских приложениях она нуждается в оптимизированных инструментах.

Один из важных параметров микробных родопсинов как оптогенетических инструментов — спектр поглощения. Данная работа нацелена на смещение их характерного спектрального пика в сторону любых, больших или меньших, длин волн — спектральную настройку. Родопсины, возбуждающиеся светом из непересекающихся областей спектра, можно совместно использовать в оптогенетике [7]. Кроме того, полезно повышать чувствительность родопсинов к красному свету, потому что он менее токсичен для клеток, а также глубже остальных видимых длин волн проникает сквозь живые ткани человека [3].

В данной работе исследуются 12 точечных мутаций родопсина VcXeR, относящегося к филогенетической ветви ксенородопсинов. Замены аминокислот, окружающих ретиналь, приводят к перераспределению зарядов и/или изменению размера полости вокруг ретиналя и тем самым меняют энергию перехода ретиналя в возбужденное состояние, т. е. длину волны поглощаемого фотона. Для каждого мутанта проведены: экспрессия и функциональные тесты в *E. coli*, солибилизация и измерение спектра поглощения. Мутации привели к сдвигу спектрального пика в синюю сторону на величины в пределах 2–30 нм. Ожидается, что конструкция двойных мутантов на основе лучших результатов одиночных замен обеспечит еще большее смещение пика поглощения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-64-00018.

## Литература

1. *Rosenberg A.* [et al.]. Microbial rhodopsins: The last two decades // *Annu. Rev. Microbiol.* 2021. V. 75(1). P. 427–447.
2. *Finkel O. M.* [et al.]. Global abundance of microbial rhodopsins // *ISME J.* 2013. V. 7(2). P. 448–451.
3. *Gordeliy V.* Rhodopsin: methods and protocols // *Springer Protocols.* 2022. V. 2501. P. 8–24, 76.
4. *Namburi P.* [et al.]. A circuit mechanism for differentiating positive and negative associations // *Nature.* 2015. V. 520(7549). P. 675–678.
5. *Sahel José-Alain* [et al.]. Partial recovery of visual function in a blind patient after optogenetic therapy // *Nat. Med.* 2021. V. 27(7). P. 1223–1229.
6. *Keppeller D.* [et al.]. Multichannel optogenetic stimulation of the auditory pathway using microfabricated LED cochlear implants in rodents // *Sci. Transl. Med.* 2020. V. 12(553): eabb8086.
7. *Klapoetke N. C.* [et al.]. Independent optical excitation of distinct neural populations // *Nat. Methods.* 2014. V. 11(3). P. 338–346.

УДК 577.352.334

### **dCache домен хеморецептора PctA: оценка функциональности по данным атомистического моделирования**

*А. Р. Идиятуллина, А. С. Кузьмин, И. Ю. Гуцин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Передача сигналов через хеморецепторы является одним из основных способов получения клеткой информации об окружающей среде. Одним из наиболее распространенных доменов хеморецепторов является домен dCache (CAlcium channels and CHEmotaxis receptors) [2, 3]. Однако на данный момент механизм передачи сигналов не до конца изучен. Понимание механизма активации может помочь в дальнейшем развитии молекулярной биологии, медицины и создании высокоэффективных модуляторов активности рецепторов.

В данной работе изучается dCache домен хеморецептора PctA *Pseudomonas aeruginosa* (синегнойной палочки), которая относится к грамотрицательным аэробным подвижным палочковидным бактериям. У PctA известно большое количество лигандов, одними из которых является большинство протеиногенных аминокислот [1, 3, 4].

Целью настоящей работы стало соотнесение структурно-динамических параметров протомеров dCache PctA, полученных методами молекулярной динамики, с экспериментальными данными. Структурные данные белка из банка данных PDB легли в основу построенных полноатомных моделей dCache в растворителе. Исследуемая система собиралась с помощью программы CHARMM-GUI, молекулярно-динамический расчет запускался с помощью программного пакета Gromacs, после чего с помощью методов молекулярной динамики были оценены структурно-динамические параметры белков, особое внимание было обращено на сайт связывания белок-лиганд. В качестве лигандов были рассмотрены три протеиногенные аминокислоты: изолейцин, триптофан и метионин. Выбраны они были на основе существенных различий в показателях аффинности: константа диссоциации с изолейцином  $K_d = (24 \pm 5,6) \mu\text{M}$ ; с триптофаном  $K_d = (2,3 \pm 0,9) \mu\text{M}$ ; с метионином  $K_d = (0,91 \pm 0,20) \mu\text{M}$  [1]. Также были рассмотрены димерные и мономерные состояния рецептора. Было показано, что изолейцин вылетал из сайта связывания белок-лиганд в построенных системах при любых условиях, тогда как метионин оставался в связанном состоянии. Эти результаты соответствуют показателям аффинности. Также было замечено изменение конформации определенных аминокислот сайта связывания во время динамики.

В дальнейшем на основе полученных структурных данных планируется построить модель, предсказывающую связывание хеморецепторов с лигандами; и с помощью этой модели осуществить оценку структурно-динамических параметров связывания лигандов с доменами dCache, которые еще не изучены экспериментально.

## Литература

1. *Rico-Jiménez M.* [et al.]. Paralogous chemoreceptors mediate chemotaxis towards protein amino acids and the non-protein amino acid gamma-aminobutyrate (GABA) // *Molecular Microbiology.* 2013. V. 88(6). P. 1230–1243.
2. *Zhang L.* [et al.]. Sensing of autoinducer-2 by functionally distinct receptors in prokaryotes // *Nat. Commun.* 2020. V. 11: 5371.
3. *Gavira J. A.* [et al.]. How bacterial chemoreceptors evolve novel ligand specificities // *mBIO.* 2020. V. 11(1): e03066-19.



4. *Rico-Jiménez M.* [et al.]. Purification, crystallization and preliminary crystallographic analysis of the ligand-binding regions of the PctA and PctB chemoreceptors from *Pseudomonas aeruginosa* in complex with amino acids // *Acta Cryst.* 2013. F69. P. 1431–1435.

УДК 577.352.335

## Моделирование различных олигомеров субъединицы с роторного кольца АТФ-синтазы из организма *Spinacia oleracea*

*А. С. Кузьмин, И. Ю. Гуцин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Роторные АТФазы являются ферментами, которые объединяют процесс синтеза/гидролиза АТФ с переносом ионов через мембрану. В общем они состоят из двух больших частей, одна из которых растворимая, а другая интегрирована в мембрану. Интегральная часть включает роторное кольцо, которое состоит из гомо- или гетероолигомеров субъединиц *c*. Большинство субъединиц *c* состоит из двух транс-мембранных спиралей, соединенных разупорядоченной областью. Известно, что некоторые кольца требуют вспомогательных белков для сборки, а другие могут собираться самостоятельно [1]. Однако на данный момент не до конца понятны причины и молекулярный механизм самоолигомеризации субъединиц *c* в роторное кольцо. Таким образом, целью данной работы является изучение механизма сборки кольца на примере роторного кольца АТФ-синтазы из хлоропласта шпината, состоящего из 14 субъединиц *c*, с помощью изучения его различных олигомерных состояний до сборки в различных по липидному составу мембранах.

В данной работе исследование проводилось при помощи метода молекулярной динамики с использованием силового поля Martini<sub>2,3</sub> [2] для крупнозернистого моделирования и силового поля CHARMM36 [3] для полноатомного моделирования, реализованного в программном пакете GROMACS [4]. В итоге было проведено крупнозернистое моделирование мономера, тетрамера, гептамера и декамера субъединицы *c* из Сгуо-ЕМ структуры [5] роторного кольца АТФ синтазы из организма *Spinacia oleracea* в различных по липидному составу мембранах, а именно, DPPC, POPC, POPC/POPG = 3:1 и 1:1, DOPC, DFPC, DFPC/DFPG = 3:1 и 1:1. Отдельно для гептамера было проведено крупнозернистое моделирование в липидах с разной насыщенностью хвостов (18:3/16:0 PC и 18:3/16:3 PC в соотношении 3:1 и 1:1) и близких к нативной тилакоидной мембране. Чтобы изучить возможность сборки олигомеров, мы провели крупнозернистое моделирование в POPC-мембране семи произвольно расставленных мономеров и двух гептамеров, расставленных на расстоянии 6,5 нм между их центрами масс. Также для всех олигомеров было проведено полноатомное моделирование в POPC-липиды, чтобы изучить стабильность данных олигомерных структур.

Анализ полученных результатов показал, что все олигомеры сохраняют свою форму и структуру и во всех вышеупомянутых мембранах имеют преимущественную ориентацию, которая, вероятно, отражает адаптацию олигомеров в соответствии с особенностями липидного окружения. Анализ состояния верхнего и нижнего монослоев для всех систем показал заметное выгибание мембраны со стороны N-концевых спиралей в NC-концевую сторону, что может способствовать сборке кольца.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (номер темы FSMG-2021-0002, соглашение 075-03-2023-106).

### Литература

1. *Novitskaia O., Buslaev P., Gushchin I.* Assembly of spinach chloroplast ATP synthase rotor ring protein-lipid complex // *Front. Mol. Biosci.* 2019. V. 6: 135.
2. *Marrink S.J.* [et al.]. The MARTINI force field: coarse grained model for biomolecular simulations // *J. Phys. Chem. B.* 2007. V. 111(27). P. 7812–7824.
3. *Huang J., MacKerell Jr A.D.* CHARMM36 all-atom additive protein force field: Validation based on comparison to NMR data // *J. Comput. Chem.* 2013. V. 34(25). P. 2135–2145.
4. *Abraham M.J.* [et al.]. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers // *SoftwareX.* 2015. V. 1. P. 19–25.
5. *Hahn A.* [et al.]. Structure, mechanism, and regulation of the chloroplast ATP synthase // *Science.* 2018. V. 360(6389): eaat4318.

## Микробный родопсин TRR1 является светочувствительной $\text{Na}^+/\text{H}^+$ -помпой

Г. А. Матвеев<sup>1</sup>, Ф. М. Цыбров<sup>1</sup>, К. В. Ковалев<sup>1,2</sup>, А. А. Алексеев<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup> Европейская лаборатория молекулярной биологии, Гамбург, Германия

Микробные родопсины — светочувствительные мембранные белки, функция которых заключается в транспорте ионов через клеточную мембрану при активации светом определенной длины волны. Такие белки нашли применение в оптогенетике — биотехнологии, использующей свойства родопсинов для модуляции живых систем при помощи света [1].

Считается, что именно микробные родопсины помогают микроскопическим организмам, таким как бактерии, археи и некоторые эукариоты, использовать свет для собственной жизнедеятельности, например, для ориентации в пространстве [2]. Светочувствительные натриевые помпы представляют особый класс микробных родопсинов. При активации светом натриевые помпы осуществляют активный транспорт ионов  $\text{Na}^+$  из клетки во внешнюю среду, тем самым создавая электрохимический потенциал, используемый клеткой для процессов жизнедеятельности.

Самый известный представитель класса светочувствительных натриевых помп — KR2 из бактерии *Krokinobacter eikastus*. Благодаря высокой ионотранспортной активности и уникальной селективности, KR2 привлек к себе внимание как потенциальный оптогенетический инструмент [3]. Углубленное изучение этого белка также показало такие его особые свойства, как способность к прокачке протонов в отсутствие натрия, сильную зависимость спектра поглощения и олигомерного состояния от pH среды. На данный момент достоверно неизвестно, являются ли эти свойства общими для всего класса натриевых помп или же они характерны только для KR2.

В этой работе исследуется микробный родопсин TRR1 из оранжевой бактерии *Trueperia radiovictrix*, который, согласно биоинформатическим данным, предположительно является светочувствительной натриевой помпой. С помощью гетерологической экспрессии TRR1 в *E. coli* удалось исследовать его биофизические свойства.

В первую очередь, благодаря измерениям pH клеточной суспензии экспрессирующих TRR1 *E. coli* при освещении, мы подтвердили тип ионной проводимости белка. Действительно, TRR1 является светочувствительной  $\text{Na}^+/\text{H}^+$ -помпой.

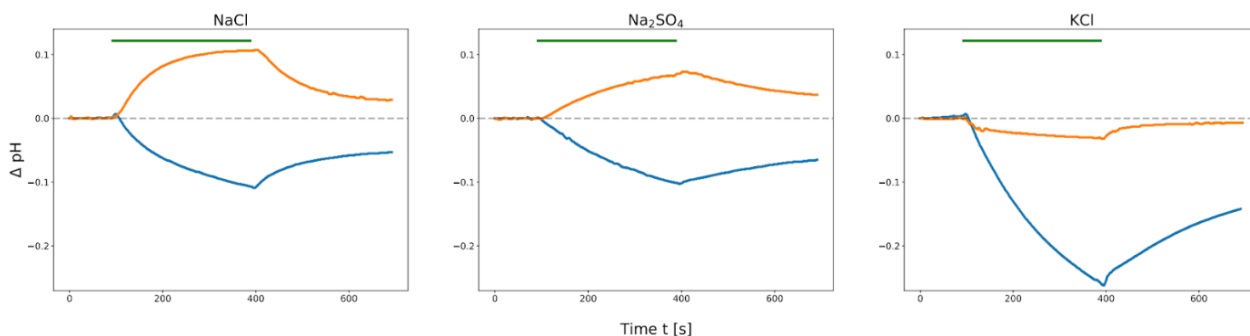


Рис. 1. Результаты экспериментов по измерению изменения pH в суспензии *E. coli*, экспрессирующих TRR1 при освещении

Исследование спектров поглощения TRR1 в видимой области показало, что он, наравне с KR2, обладает сильной спектральной зависимостью от pH — «ретиналевый» пик поглощения белка смещается от 522 нм при pH 8,0 до 544 нм при pH 4,0. Мутагенез KR2 показывает, что это происходит вследствие протонирования противоположно заряженного остатка D116, находящегося в непосредственной близости основания Шиффа ретиналя [4]. Благодаря полученной зависимости спектра поглощения при различных pH —  $\text{Abs}(\lambda, \text{pH})$  — удалось найти характерную константу диссоциации в этом процессе  $\text{pK}_a = 6,3$ , находящуюся в согласии с аналогичной константой KR2 [5].

В результате с использованием времязрешенной спектроскопии были исследованы фотоциклы TRR1. Они показали, что при pH 8,5 в присутствии ионов  $\text{Na}^+$  фотоцикл родопсина состоит из пяти состояний и имеет длительность около 1 с. В то же время в их отсутствие в фотоцикле всего четыре состояния, при этом общая его длительность больше — возрастает до 4 с. В случае pH 4,3 фотоциклы состоят из двух состояний и с ионами  $\text{Na}^+$ , и без них. Таким образом, можно еще раз заключить, что

спектральная кинетика TRR1 в большой степени зависит от pH и наличия натрия в среде, в очередной раз указывая на сходство с KR2 [6].

Данная работа показала, что светочувствительная натриевая помпа TRR1 обладает схожими с KR2 биофизическими свойствами и параметрами. Подобная характеристика подкрепляет предположение о том, что эти свойства являются консервативными среди всех натриевых помп.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-64-00018.

### Литература

1. *Klapoetke N., Murata Y., Kim S.* [et al.]. Independent optical excitation of distinct neural populations // Nat. Methods. 2014. V. 11. P. 338–346.
2. *Van der Horst M. A.* [et al.]. Photosensing in chemotrophic, non-phototrophic bacteria: let there be light sensing too // Trends Microbiol. 2007. 15(12). P. 554–562.
3. *Hososhima S., Kandori H., Tsunoda S.P.* Ion transport activity and optogenetics capability of light-driven Na<sup>+</sup>-pump KR2 // PLOS ONE. 2021. V. 16(9): e0256728.
4. *Kovalev K., Astashkin R., Gushchin I.* [et al.]. Molecular mechanism of light-driven sodium pumping // Nat. Commun. 2020. V. 11(1): 2137.
5. *Inoue K., Ono H., Abe-Yoshizumi R.* [et al.]. A light-driven sodium ion pump in marine bacteria // Nat. Commun. 2013. V. 4: 1678.
6. *Gushchin I., Shevchenko V., Polovinkin V.* [et al.]. Crystal structure of a light-driven sodium pump // Nat. Struct. Mol. Biol. 2015. V. 22. P. 390–395.

УДК 577.352.45

## Особенности функционирования протеродопсинов с DTS/DTG мотивом в зависимости от pH

*С. М. Бухалович, А. П. Полякова, Д. Ф. Багаева, Н. С. Ильинский, А. Д. Власова*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Стандартные методы функциональной характеристики каналов и помп, в том числе и родопсинов, как правило, имеют ряд особенностей, из-за которых часто теряется или не учитывается важная информация о их работе. Наблюдение отдельных параметров с помощью некоторых методов и вовсе невозможно. Например, для большинства методов сложно или невозможно создать разное окружение для цитоплазматической и внеклеточной части белка, в том числе и pH. Времяразрешенная спектроскопия, регистрация фототоков с помощью билипидной мембраны, измерение концентрации ионов для суспензии клеток не позволяют менять условия, в которых находится белок по обе стороны от мембраны. Частично или полностью можно контролировать эти условия с помощью флуоресцентной микроскопии и метода локальной фиксации потенциала (patch-clamp).

В данной работе использовался метод конфокальной флуоресцентной микроскопии в сочетании с генетически кодируемыми флуоресцентными pH чувствительными зондами (pHluorin, SypHer3s). В конструкции для лизосомального импорта [1] и экспрессии на плазматической мембране протонная помпа Arch3 была заменена на прямые протонные помпы с DTS/DTG-мотивом: из *Sphingomonas paucimobilis* (SpaR) и из *Pseudomonas putida* (PspR). Ранее было показано, что данные белки имеют характерную pH-зависимость [2, 3]. А именно, светоиндуцируемый перенос протонов наиболее эффективен при кислых pH и почти полностью прекращается, когда белок с обеих сторон окружен буфером с нейтральным или щелочным pH. SpaR и PspR были экспрессированы в клеточных линиях HeLa и/или HEK293T. В итоге при освещении клеток, содержащих данные родопсины в плазматической мембране или лизосомах, при оптимальном pH со стороны N-конца и нейтральном pH с C-конца белка не проявлялось заметного изменения флуоресценции зондов в соответствующих компартментах. После частичной пермеабилзации и замены среды на кислый буфер наблюдалось значительное изменение флуоресценции.

Эти результаты могут означать, что для значительной работы родопсинов с DTS/DTG-мотивом требуется наличие буфера с кислым значением pH либо с обоих концов родопсина, либо с C-конца. Требуются дальнейшие исследования для детализации функционирования данной группы родопсинов и возможного применения для влияния на физиологические параметры клеток человека.

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

## Литература

1. *Rost B. R.* [et al.]. Optogenetic acidification of synaptic vesicles and lysosomes // *Nat. Neurosci.* 2015. V. 18(12). P. 1845–1852.
2. *Маляр Н.* [et al.]. Новый pH-чувствительный микробный родопсин из *Sphingomonas Paucimobilis* // Доклады Российской академии наук. Науки о жизни. 2020. Т. 495. № 1. С. 658–662.
3. *Suzuki K.* [et al.]. Structural characterization of proton-pumping rhodopsin lacking a cytoplasmic proton donor residue by X-ray crystallography // *J. Biol. Chem.* 2022. V. 298(3): 101722.

УДК 577.322.4

### Дизайн генетических конструкций для структурно-функциональных исследований GPCR, ассоциированного с патогенезом заболеваний репродуктивной системы

*А. Н. Хныкин, П. А. Хорн, А. П. Лугинина, Е. А. Смирнова, А. В. Мишин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рецепторы, сопряженные с G-белком (GPCRs), являются одним из самых больших семейств белков человека, которое насчитывает более 800 представителей, что составляет примерно 5% генома человека [1–3]. Эти семиспиральные мембранные белки в процессе связывания специфических лигандов преобразуют внеклеточные сигналы и запускают каскады внутриклеточных реакций, чем обуславливают участие GPCRs в регуляции многочисленных биохимических и физиологических процессов. Роль лигандов могут выполнять как природные вещества, так и синтетические, разработанные в качестве лекарств против ряда заболеваний, в возникновении и развитии которых участвуют белки семейства GPCR [4].

Перспективные методы дизайна лекарственных препаратов основываются на трехмерной структуре белка-мишени, определение которой требует миллиграммы стабильного и функционального белка [5]. Для получения функционального белка в достаточных количествах применяются различные подходы: модификация ДНК-конструкций введением точечных термостабилизирующих мутаций, введение в определенные участки гена целевого рецептора последовательности белков-партнеров, удаление участков гена, а также подбор условий экспрессии и выделения рецептора.

В качестве кандидата для определения пространственной структуры нами был выбран рецептор, связанный с патогенезом заболеваний репродуктивной системы. Подсемейство данного рецептора сейчас активно исследуется, и за прошедший год были получены структуры двух его представителей. Также проводились исследования по поиску синтетических лигандов, но селективных лигандов к целевому рецептору не было обнаружено. В качестве метода для получения пространственной структуры выбранного рецептора нами был выбран метод рентгеноструктурного анализа, который подразумевает получение кристаллов белка. Для этого была проведена пробная экспрессия целевого рецептора, модифицированного минимальным набором меток и белком-партнером, в клетках насекомых (*Sf9*) с помощью бакуловируса (*Vac-to-Vac*, Invitrogen). Результаты экспрессии показали необходимость дальнейшей оптимизации генетических конструкций.

Для улучшения экспрессии и увеличения стабильности исследуемого белка был проведен дизайн ряда ДНК-конструкций с использованием данных о структурных исследованиях представителей семейства, к которым относится целевой рецептор. Для создания генетических конструкций были использованы различные подходы проведения полимеразной цепной реакции (ПЦР). Наиболее стабильная и функционально активная конструкция в дальнейшем позволит осуществить разработку лигандов к белку-мишени.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 22-74-10036.

## Литература

1. *Fredriksson R.* [et al.]. The G-protein-coupled receptors in the human genome form five main families. Phylogenetic analysis, paralogon groups, and fingerprints // *Mol. Pharmacol.* 2003. V. 63(6). P. 1256–1272.
2. *Ly X.* [et al.]. In vitro expression and analysis of the 826 human G protein-coupled receptors // *Protein & cell.* 2016. V. 7(5). P. 325–337.
3. *Zhang Y., DeVries M. E., Skolnick J.* Structure modeling of all identified G protein-coupled receptors in the human genome // *PLoS Comput. Biol.* 2006. V. 2(2): e13.
4. *Hauser A. S.* [et al.]. Trends in GPCR drug discovery: new agents, targets and indications // *Nat. Rev. Drug Discovery.* 2017. V. 16(12). P. 829–842.

5. Milić D., Veprintsev D. B. Large-scale production and protein engineering of G protein-coupled receptors for structural studies // Front. Pharmacol. 2015. V. 6: 66.

УДК 577.352.45

## Формирование О-состояния у протеородопсинов с DTG/DTS мотивом

Д. В. Сидоров, С. М. Бухалович, Ф. М. Цыбров, А. Э. Михайлов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Протеородопсин из *Sphingomonas paucimobilis* (*SpaR*) представляет собой микробный родопсин с DTS мотивом. В нескольких работах было показано, что *SpaR* и его гомологи относятся к pH-чувствительным прямым протонным помпам [1–2]. В щелочных и нейтральных pH наблюдается ингибирование их работы. Для многих родопсинов О-состояние является конечным и наиболее длительным [3–4]. Мы показываем, что оптически наблюдаемое состояние соответствует важному шагу в переносе протона через мембрану.

В данной работе была показана зависимость фотоциклов белка *SpaR* и его гомолога, протеородопсина с DTG мотивом из *Pseudomonas putida* (*PspR*), от pH. Было показано, что О-состояние удлиняется и становится визуально наблюдаемым при увеличении pH. Для наблюдения за фотореакциями использовался метод время-разрешенной спектроскопии (flash-photolysis), который обеспечивает более полные данные, которые важны для анализа белков.

Можно утверждать, что удлинение фотоцикла происходит за счет формирования О-состояния. При этом наблюдается параллельное уменьшение протонтранспортной активности белка.

### Литература

1. Маляр Н. [и др.]. Новый pH-чувствительный микробный родопсин из *Sphingomonas Paucimobilis* // Доклады Российской академии наук. Науки о жизни. 2020. Т. 495. № 1. С. 658–662.
2. Suzuki K. [et al.]. Structural characterization of proton-pumping rhodopsin lacking a cytoplasmic proton donor residue by X-ray crystallography // J. Biol. Chem. 2022. V. 298(3): 101722.
3. Inoue K. [et al.]. The Role of the NDQ Motif in Sodium-Pumping Rhodopsins // Angewandte Chemie. 2015. V. 127(39). P. 11698–11701.
4. Chernavskii D. S. [et al.]. Kinetic model of bacteriorhodopsin photocycle: pathway from M state to bR // Photochem. Photobiol. 1989. V. 49(5). P. 649–653.

УДК 577.112.083

## Исследование олигомерных состояний термокиназы DesK

Д. Д. Куikliна<sup>1</sup>, М. И. Рулев<sup>2</sup>, Т. Н. Муругова<sup>2</sup>, Е. А. Дронова<sup>1</sup>, Ю. С. Семенов<sup>1</sup>, А. И. Куклин<sup>1,2</sup>,  
Ю. Л. Рижиков<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна

Исследуемым объектом является гистидин-киназа DesK из *Bacillus subtilis*. DesK выполняет роль термосенсора, который при понижении температуры активирует регулятор ответа DesR, отвечающий за кратковременную индукцию транскрипции гена *des*, кодирующего липидную десатуразу,  $\Delta 5$ -Des. Этот фермент вносит двойную связь в ацильную цепь в фосфолипиды, что позволяет сохранить подвижность мембраны. Сенсорные гистидин-киназы (наряду с фото-, хеморецепторами и др.) являются трансмембранными рецепторами двухкомпонентных сигнальных систем (ДКС) — самых распространенных сигнальных систем в природе, которые, однако, отсутствуют в клетках млекопитающих [1]. DesK представляет особый интерес для изучения механизмов передачи сигнала ДКС через бактериальную мембрану, так как обладает сравнительно небольшой цитоплазматической частью (~100 Å вдоль нормали к мембране), что может позволить получить кристаллы белка в липидной кубической фазе для последующего решения атомарной структуры с помощью рентгеноструктурного анализа. Для данного типа кристаллиза-

ции ограничительным параметром является диаметр водного канала, который достигает величины не больше 20 нм [2].

В данной работе исследуется зависимость олигомерных состояний термокиназы DesK от условий экспрессии в *E. coli* (BL21DE3). При экспрессии в классическом ТВ (Terrific Broth) с 1,2% триптона и 2,4% дрожжевого экстракта значительная часть белка находится в состоянии, характеризующимся большим олигомерным числом (предположительно равным 6). На рис. 1а приведена эксклюзионная хроматография такого комплекса, первый пик соответствует агрегатам, на объеме 10–13 мл элюируются олигомеры. Правый пик соответствует мономерам DesK, что подтверждается данными малоуглового рентгеновского рассеяния (рис. 2), а также кросслинкинга с помощью NHS и EDC [3]. В случае экспрессии в такой же среде, но с содержанием 0,6% триптона и 1,2% дрожжевого экстракта, олигомерная фракция отсутствует. Примечательно, что для мономера сохраняется классический белковый спектр поглощения с пиком на 280 нм, в то время как для олигомерной фракции этот пик смещается на 10 нм в синюю сторону (рис. 1б). Данный результат хорошо согласуется с предположением, что данный белковый комплекс связал АТФ/АДФ, так как, во-первых, по литературным данным [4] известно, что в составе сенсорных гистидинкиназ присутствует каталитический домен, способный связывать молекулы АТФ/АДФ (СА домен, Catalytic and ATP-binding), а во-вторых, пик поглощения АТФ приходится на 259 нм [5], что объясняет наблюдаемое изменение спектра. Вероятно, повышенная питательность среды позволяет клеткам иметь избыток АТФ, которая связывается с мономером белка и провоцирует изменение его конформации, что, в свою очередь, может приводит к образованию олигомеров.

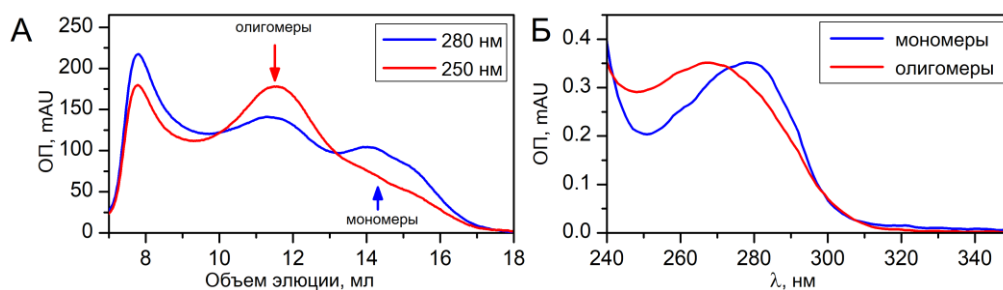


Рис. 1. Эксклюзионная хроматография DesK, график зависимости оптической плотности на 250 и 280 нм от объема элюции. Отмечены пики элюции олигомеров 10–13 мл и мономеров 13–16 мл (а); спектры поглощения мономеров и олигомеров DesK (б)

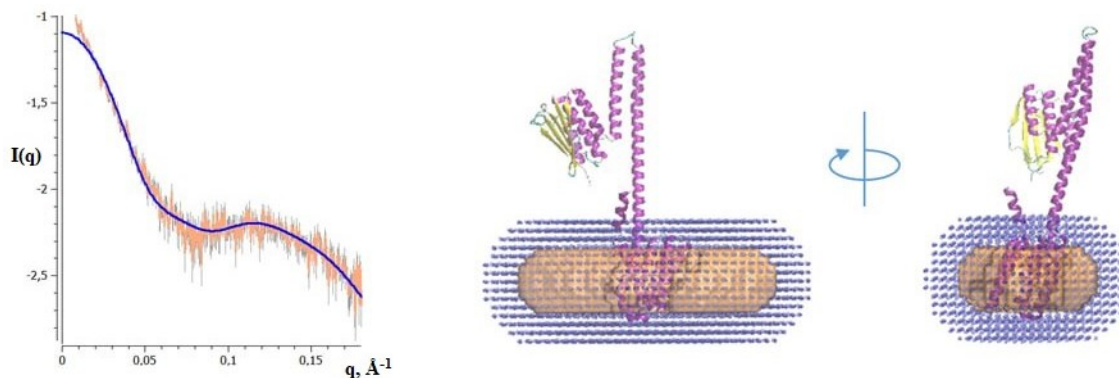


Рис. 2. Слева — кривая малоуглового рентгеновского рассеяния, полученная для мономерной фракции (показана оранжевым) на установке Rigaku MicroMax-007 HF [6] (МФТИ) и аппроксимация данных (синяя кривая), полученная в соответствии с моделью, показанной справа. Справа — молекулярная модель термокиназы DesK, полученная с помощью AlphaFold2 [7], дополненная детергентным поясом в псевдоатомарном представлении с помощью программы MEMPROT [8]

Полученные результаты могут объяснять, почему в аналогичных исследованиях аммониевого сенсора AMT5 [9] не удалось разрешить структуру цитоплазматической части. Для экспрессии рекомбинантного белка авторы использовали LB, в результате чего белок получился в тримерном состоянии, не свойственном для гистидин-киназ, DНр-домен (Dimerization Histidine phosphotransfer) не был димеризован и, как следствие, не был стабилизирован. Обнаруженная зависимость олигомерного состояния от питательности среды может позволить обеспечивать правильный дизайн экспериментов, направленных на изучение рекомбинантных белков, содержащих СА-домен. Приведенное в данной работе олигомерное

состояние (предположительно гексамер) открывает перспективы не только для рентгеноструктурного анализа, но и для крио-ЭМ исследований структуры, так как масса олигомера составляет более 240 кДа.

## Литература

1. Ryzhykau Y. L. [et al.]. Molecular model of a sensor of two-component signaling system // Sci. Rep. 2021. V. 11(1): 10774. DOI: 10.1038/s41598-021-89613-6.
2. Zabara A. [et al.]. Design of ultra-swollen lipidic mesophases for the crystallization of membrane proteins with large extracellular domains // Nat. Commun. 2018. V. 9(1): 544. DOI: 10.1038/s41467-018-02996-5.
3. Budyak I. L. [et al.]. Shape and oligomerization state of the cytoplasmic domain of the phototaxis transducer II from *Natronobacterium pharaonicum* // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2006. V. 103(42). P. 15428–15433. DOI: 10.1073/PNAS.0607201103.
4. Capra E. J., Laub M. T. Evolution of two-component signal transduction systems // Annu. Rev. Microbiol. 2012. V. 66. P. 325–347. DOI: 10.1146/annurev-micro-092611-150039.
5. Patrice F. T. [et al.]. Spectroelectrochemical study of the AMP-Ag<sup>+</sup> and ATP-Ag<sup>+</sup> complexes using silver mesh electrodes // Analyst. 2018. V. 143(10). P. 2342–2348. DOI: 10.1039/C8AN00097B.
6. Murugova T. N. [et al.]. Low resolution structural studies of apoferritin via SANS and SAXS: The effect of concentration // J. Optoelectron. Adv. Mater. 2015. V. 17(9–10). P. 1397–1402.
7. Cramer P. AlphaFold2 and the future of structural biology // Nat. Struct. Mol. Biol. 2021. V. 28(9). P. 704–705. DOI: 10.1038/s41594-021-00650-1.
8. Pérez J., Koutsioubas A. Memprot: a program to model the detergent corona around a membrane protein based on SEC–SAXS data // Acta Crystallogr., Sect. D: Biol. Crystallogr. 2015 V. 71 (Pt. 1). P. 86–93. DOI: 10.1107/S1399004714016678.
9. Pflüger T. [et al.]. Signaling ammonium across membranes through an ammonium sensor histidine kinase // Nat. Commun. 2017. V. 9(1): 164. DOI: 10.1038/s41467-017-02637-3.

УДК 579.258

## Исследование регуляции экспрессии гена ферритина А в клетках *Escherichia coli*

А. Д. Гребенникова, С. В. Баженов, И. В. Манухов

Московский Физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Ферритин и белки ферритинового семейства играют чрезвычайно важную роль в живых организмах, обеспечивая процесс окисления и запасания железа [1]. Гены ферритина встречаются в геномах организмов всех доменов живого мира, включая бактерии, археи и практически все эукариотические организмы. Экспериментально было показано, что в клетках *Escherichia coli* экспрессия гена *ftnA* (ферритин А) активируется железо-зависимым активатором транскрипции F<sub>ur</sub> в комплексе с Fe<sup>2+</sup> за счет его конкурентного связывания ДНК в промоторной области и вытеснения репрессора HNS [2]. Прямых доказательств активации экспрессии *ftnA* в ответ на окислительный стресс в литературе не описано, однако логично предположить, что белок, предотвращающий реакцию Фентона и защищающий клетку от окислительного повреждения, должен вырабатываться при условиях окислительного стресса в большем количестве. Кроме того, встречаются косвенные свидетельства того, что экспрессия *ftnA E. coli* может индуцироваться белком OxyR в ответ на окислительный стресс [3]. У облигатных анаэробов *Bacteroides fragilis* экспрессия *ftnA* сильно регулируется окислительно-восстановительным потенциалом [4].

Целью данной работы являлась проверка активации промотора гена *ftnA* в ответ на окислительный стресс в клетках *E. coli*.

Для того чтобы получить биосенсор на основе клеток *E. coli* и промотора гена *ftnA E. coli*, был использован беспромоторный репортерный вектор pDEW201 [5], содержащий *luxCDABE* гены *Photobacterium luminescens*. Фрагмент ДНК, содержащий промотор гена *ftnA*, был амплифицирован на матрице хромосомальной ДНК *E. coli* MG1655 и встроен методом Gibson Assembly перед генами *luxCDABE* в вектор pDEW201, линеаризованный по сайтам рестрикции EcoRI и BamHI. В результате трансформации клеток *E. coli* MG1655 рекомбинантной плазмидой pFtnA-lux были получены биосенсорные клетки, в которых экспрессия оперона *luxCDABE* контролируется промотором гена *ftnA*. Далее была измерена люминесценция полученных клеток при добавлении перекиси водорода в различных концентрациях (рис. 1).

Перекись водорода повреждает бактериальные клетки и вызывает окислительный стресс. При добавлении перекиси водорода в больших концентрациях (0,1 и 1 мМ) наблюдается быстрая гибель значительной части клеток в пробе, что приводит к падению люминесценции в самом начале измерений. При продолжительных измерениях было зафиксировано, что перекись водорода способна вызывать усиление транскрипции с промотора P<sub>ftnA</sub>, наибольшее усиление светимости клеток — двукратное — было при

концентрации  $H_2O_2$  0,1 мМ, наименьшая концентрация перекиси, способная индуцировать сконструированный биосенсор, — 10 мкМ. Таким образом, было показано, что экспрессия гена *ftnA* может индуцироваться в ответ на окислительный стресс, вызванный перекисью водорода. В дальнейшем планируется определить роль регулятора транскрипции OxyR в наблюдаемой активации путем использования штамма *E. coli*, мутантного по гену *oxyR*.

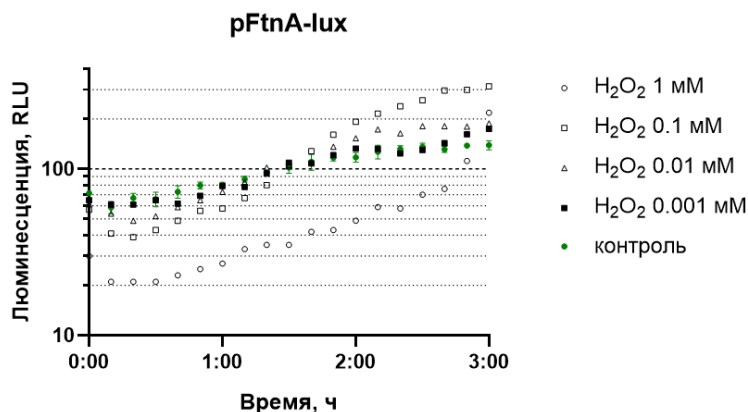


Рис. 1. Изменение люминесценции биосенсорных клеток *E. coli* MG1655 pFtnA-lux при добавлении  $H_2O_2$  в различных концентрациях

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 22-74-10047.

### Литература

1. Sudarev V. V. [et al.]. Ferritin self-assembly, structure, function, and biotechnological applications // Int. J. Biol. Macromol. 2023. V. 224. P. 319–343.
2. Nandal A. [et al.]. Induction of the ferritin gene (*ftnA*) of *Escherichia coli* by  $Fe(2+)$ -Fur is mediated by reversal of H-NS silencing and is RyhB independent // Mol. Microbiol. 2010. V. 75. P. 637–657.
3. Pascoe M. J. [et al.]. Exposure of *Escherichia coli* to human hepcidin results in differential expression of genes associated with iron homeostasis and oxidative stress // FEMS Microbiol. Lett. 2018. V. 365(10): 89.
4. Rocha E. R., Smith C. J. Transcriptional regulation of the *Bacteroides fragilis* ferritin gene (*ftnA*) by redox stress // Microbiology. 2004. V. 150. P. 2125–2134.
5. Van Dyk T. K., Rosson R. A. Phototransduction luminescence luxCDABE promoter probe vectors // Methods Mol. Biol. 1998. V. 102. P. 85–95.

УДК 535.372

### Стационарная и времяразрешенная флуоресцентная спектроскопия в исследовании структурных свойств меланина

П. С. Касьянова<sup>1</sup>, Б. П. Якимов<sup>1</sup>, А. В. Гайер<sup>1</sup>, В. И. Щеславский<sup>2</sup>, М. В. Ширманова<sup>2</sup>, В. В. Елагин<sup>2</sup>,  
Е. А. Ширшин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

<sup>2</sup>Приволжский исследовательский медицинский университет

Исследование оптических свойств молекулярных систем, вовлеченных в патологические состояния, дает информацию о структурных нарушениях, характерных для этих состояний. Так, фундаментальный интерес к оптическим свойствам меланина связан с потенциалом неинвазивной диагностики меланомы — опасного рака кожи.

В работе [1] было показано, что с помощью метода накачки-зондирования с фемтосекундным временным разрешением можно детектировать различия в оптических свойствах меланинов из доброкачественных родинок и меланом. Также в работе [2] при изучении систем, аналогичных наночастицам меланина, было продемонстрировано, что сверхбыстрые времена жизни флуоресценции (~10 пс) могут определяться межмолекулярным взаимодействием.

В данной работе изучается взаимосвязь структурных и оптических свойств меланина методами стационарной и времяразрешенной флуоресцентной спектроскопии. На трех моделях структурно отлича-



ющихся образцов меланина — синтетического меланина, изготовленного путем полимеризации 5,6-дигидроксииндоловой кислоты, натурального меланина, выделенного из *Sepia officinalis*, и меланина, нарабатанного в клетках меланомы — исследованы свойства стационарного поглощения, спектральные и временные свойства флуоресцентного отклика, возбуждаемого на различных длинах волн. Спектр поглощения меланина в видимой области имеет форму кривой, экспоненциально спадающей с увеличением длины волны. Коэффициент в показателе экспоненты — спектральный наклон — используется как количественный показатель различий в поглощении. Стационарная флуоресцентная спектроскопия показала, что образец из раковых клеток обладает более коротковолновым спектром эмиссии флуоресценции при возбуждении на длине волны 400 нм. Времяразрешенная спектроскопия показала различия во временах и амплитудах кинетик затухания флуоресценции.

Результаты этого исследования могут быть применены к методу визуализации времен жизни флуоресценции с микроскопическим пространственным разрешением (FLIM, fluorescence lifetime imaging microscopy), который уже имеет широкое применение при анализе клеток кожи [3]. Так как современные детекторы в методе FLIM имеют временное разрешение порядка нескольких десятков пикосекунд [4], разработанные в данном исследовании методы смогут быть использованы в клинической практике на базе уже существующего оборудования.

### Литература

1. Ju K. Y. [et al.]. Unraveling the molecular nature of melanin changes in metastatic cancer // J. Biomed. Opt. 2019. V. 24(5): 051414.
2. Yakimov B. P. [et al.]. Ultrafast energy transfer determines the formation of fluorescence in dom and humic substances // Environ. Sci. Technol. 2021. V. 55(15). P. 10365–10377.
3. Kröger M. [et al.]. Label-free imaging of M1 and M2 macrophage phenotypes in the human dermis in vivo using two-photon excited FLIM // Elife. 2022. V. 11: e72819.
4. Hybrid Single-Photon Detectors // Becker & Hickl [сайт]. — URL: <https://www.becker-hickl.com/products/hybrid-photo-detectors/> (дата обращения 13.03.2023).

УДК 535.346

### Методы оптической спектроскопии для определения состава и плотности конкрементов

**П. С. Церегородцева<sup>1</sup>, Н. В. Злобина<sup>1,2</sup>, З. А. Геворкян<sup>1,2</sup>, Г. С. Будылин<sup>2,3</sup>, Н. И. Сорокин<sup>2</sup>,  
Е. А. Шишин<sup>1,2</sup>, А. А. Камалов<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

<sup>2</sup>Медицинский научно-образовательный центр Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова

<sup>3</sup>Первый Московский государственный медицинский университет им. И. М. Сеченова

К одним из наиболее распространенных урологических заболеваний относится мочекаменная болезнь. Эффективным методом терапии данной патологии является лазерная литотрипсия, подразумевающая дробление камней с помощью лазерного ИК-излучения. Как известно, конкременты имеют различный химический состав и морфологические особенности [1], что влияет на выбор режима дробления. Таким образом, целью данной работы стало исследование возможностей применения ряда оптических методов для оценки состава и плотности конкрементов.

В данной работе для определения состава и плотности камней использовались такие оптические методы спектроскопии, как спектроскопия диффузного отражения света и спектроскопия комбинационного рассеяния света (КР). Первый метод основан на различиях, связанных с цветом камней, таким образом, предполагалось, что данные особенности будут проявляться и в спектрах диффузного отражения. По спектру КР можно исследовать колебательный спектр конкремента, а следовательно, определять его молекулярный состав [2, 3]. Исследование проводилось *ex vivo* на конкрементах, собранных МНОЦ МГУ. Для приближения условий измерения спектров диффузного отражения к условиям освещения в ходе операций в качестве источника света выступал гибкий уретроскоп Pusen. Спектры КР были получены на рамановском конфокальном микроскопе, с их помощью был проанализирован молекулярный состав конкрементов. Состав камней, полученный по данным спектроскопии КР, был сопоставлен с химическим составом конкрементов, определенным с помощью метода растровой электронной микроскопии.

Для определения типа камня была проведена классификация по спектрам оптической плотности (OD), которые рассчитывались следующим образом:

$$OD = -\ln R, \quad R = \frac{I - I_{\text{dark}}}{I_{\text{ref}} - I_{\text{dark}}},$$

где  $R$  — спектр отражения,  $I_{\text{dark}}$  — фоновый сигнал,  $I_{\text{ref}}$  — спектр референсного образца и  $I$  — спектр исследуемого образца. Чувствительность и специфичность на тестовых данных составили более 90%. Характерные спектры оптической плотности для трех типов камней представлены на рис. 1. Также была построена регрессионная модель для определения плотности камней по форме спектров диффузного отражения. Предварительно плотности камней были определены с помощью метода компьютерной томографии. Средняя относительная ошибка определения плотности конкрементов составила менее 20%.

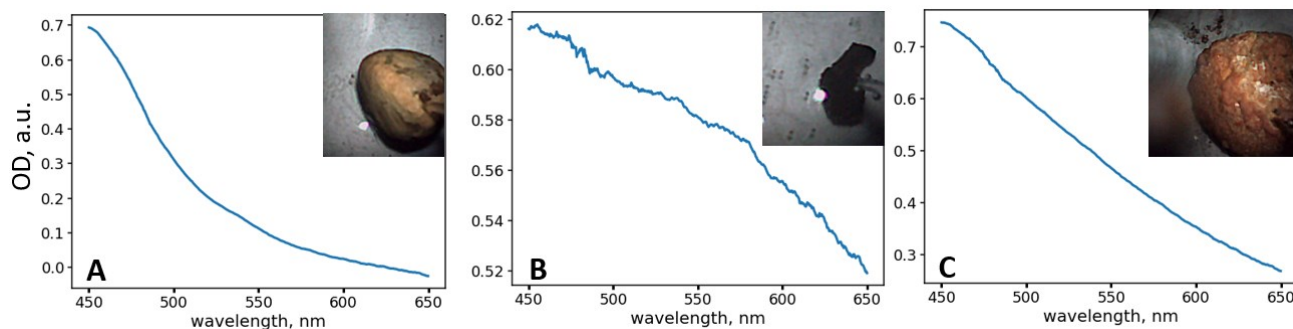


Рис. 1. Характерный вид спектров оптической плотности для различных типов конкрементов: *A* — уратный камень, *B* — оксалатный камень, *C* — гидроксиапатит

### Литература

1. *Corrales M.* [et al.]. Classification of stones according to Michel Daudon: a narrative review // *Eur. Urol. Focus.* 2021. V. 7(1). P. 13–21.
2. *Kodati V. R.* [et al.]. Raman spectroscopic identification of phosphate-type kidney stones // *Appl. Spectrosc.* 1991. V. 45(4). P. 581–583.
3. *Cui X.* [et al.]. Analysis and classification of kidney stones based on Raman spectroscopy // *Biomed. Opt. Express.* 2018. V. 9(9). P. 4175–4183.

УДК 577.322

### Использование фрагментов антител для структурных исследований GPCR

*А. А. Садова, Д. А. Дмитриева, М. Б. Шевцов, Н. А. Сафронова, Е. А. Смирнова, Т. С. Куркин, В. И. Борщевский, А. В. Мишин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рецепторы, сопряженные с G-белком (GPCR), — важнейший класс мембранных рецепторов, ответственный за множество процессов в организме: от регуляции кровяного давления до зрения и вкуса. Изучение структуры GPCR является первостепенной задачей современной структурной биологии; главными результатами получения структуры GPCR являются определение молекулярного механизма их функционирования и дизайн лекарственных препаратов, воздействующих на рецепторы. На сегодняшний день основным методом получения структуры GPCR является рентгеновская кристаллография, но в последние несколько лет набирает популярность и криоэлектронная микроскопия. Однако оба эти метода имеют свои недостатки в применении к GPCR. Кристаллы белков, в особенности мембранных, достаточно сложно вырастить, и эти кристаллы не всегда стабильны. Микроскопия же позволяет увидеть частицы массой более 100 кДа, в то время как масса большинства GPCR не превышает 50 кДа. Решением этих проблем могут служить высокоспецифичные белки-партнеры — фрагменты антител. Они могут помочь сформировать кристаллизационные контакты между молекулами рецепторов, а в криоэлектронной микроскопии они увеличивают размер исследуемых молекул и нарушают симметрию белка, задавая выделенное направление и делая возможной обработку экспериментальных данных.

В работе исследуются два белка-партнера и их взаимодействие с GPCR. Нанотело Nb6, полученное против капша-опиоидного рецептора (KOR) [1], стабилизирует GPCR в неактивной конформации. Эпитоп для связывания Nb6, третья внутриклеточная петля KOR, может быть перенесен в другие GPCR без

потери их функциональности [2]. На сегодняшний день уже получено несколько структур GPCR в комплексе с Nb6 [2,3], что делает это нанотело перспективным объектом исследований. Другой белок — Bag2 — Fab-фрагмент, соединяющийся с популярным фьюжн-партнером апоцитохромом BRIL [4]. Привлекательность этого антительного фрагмента заключается в том, что конструкции GPCR, слитые с BRIL, часто имеют большие выходы и хорошие показатели мономерности и термостабильности, а также не требуют внесения изменений непосредственно в аминокислотную последовательность рецептора.

В данной работе была проведена экспрессия Nb6 и Bag2 в *E.coli*. Данные белки были очищены, были оценены их мономерность (при помощи аналитической гель-фильтрации и гель-электрофореза) и термостабильность. По результатам этих экспериментов оба белка показывают достаточную степень чистоты и стабильности. Далее было проведено образование комплексов с несколькими рецепторами; образование комплексов было оценено при помощи гель-фильтрации и электронной микроскопии с негативным контрастированием. Полученные образцы были заморожены на сетках для последующих измерений на криоэлектронном микроскопе, также с полученными образцами была проведена кристаллизация.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (договор №075-03-2023-106, проект FSMG-2020-0003).

### Литература

1. Che T. [et al.]. Structure of the nanobody-stabilized active state of the kappa opioid receptor // Cell. 2018. V. 172(1–2). P. 55–67.
2. Che T. [et al.]. Nanobody-enabled monitoring of kappa opioid receptor states // Nat. Commun. 2020. V. 11: 1145.
3. Robertson M. J. [et al.]. Structure determination of inactive-state GPCRs with a universal nanobody // Nat. Struct. Mol. Biol. 2022. V. 29. P. 1188–1195.
4. Mukherjee S. [et al.]. Synthetic antibodies against BRIL as universal fiducial marks for single-particle cryoEM structure determination of membrane proteins // Nat. Commun. 2020. V. 11(1): 1598.

УДК 577.112.7

### Изучение возможности обмена субъединицами между молекулами апоферритина

**М. С. Гетте<sup>1</sup>, В. В. Сударев<sup>1</sup>, Ю. Л. Рижиков<sup>1,2</sup>, С. В. Баженов<sup>1</sup>, И. В. Манухов<sup>1</sup>, М. Б. Шевцов<sup>1</sup>,  
А. И. Ку克林<sup>1,2</sup>, А. В. Власов<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт ядерных исследований

Ферритин — полисубъединичный белковый комплекс, отвечающий за хранение железа в различных органах. Одним из важнейших свойств ферритина является спонтанное образование сферической полый белковой глобулы, состоящей из 24 субъединиц [1]. Ферритин широко используется в биотехнологии, в частности при создании рекомбинантных вакцин на основе вирусного антигена [2]. Процесс самосборки играет важную роль в функционировании подобных белков, однако его молекулярный механизм до сих пор до конца не изучен [2]. Также остается открытым вопрос, какой вид динамического равновесия характерен для системы ферритина в буферных растворах. В частности, представляет интерес исследование возможности обмена субъединицами между двумя белковыми глобулами ферритина.

В работе были получены рекомбинантные белковые комплексы на основе ферритина из *Helicobacter pylori*. Конструкции представляют собой апоферритин с модификацией N-концевого участка. Первая конструкция (“FerHis6”) содержит гистидиновую метку (пептид из 6 гистидинов), вторая — гистидиновую метку с присоединенным Sumo-белком (“FerSumoHis6”). Построенные с помощью структур высокого разрешения (3BVE ферритин, 1L2N SUMO) модели полученных белковых комплексов имеют диаметр 12 нм и 20 нм соответственно и могут быть разделены на гель-фильтрационной хроматографии (ГФХ).

Проведена экспрессия и никелевая очистка полученных конструкций. В результате получены рекомбинантные белковые комплексы “FerHis6” и “FerSumoHis6”, состоящие из 24 субъединиц (по данным электронной микроскопии негативного контрастирования и малоуглового рентгеновского рассеяния). Для изучения возможности обмена субъединицами между комплексами были проведены ГФХ растворов белков “FerHis6”, “FerSumoHis6”, а также их эквимольной смеси. Эксперимент повторили спустя три недели, в течение которых образцы хранились при +4°C. Хроматография проводилась с помощью системы ÄKTA Purifier и с использованием хроматографической колонки Superose6 10/300 GL. Объем

элюции “FerSumoHis6” составляет 8 мл, “FerHis6” — 10 мл. На гель-фильтрационной кривой для смеси белков видны два разрешенных пика. Профиль хроматограммы не изменился после инкубации; характерное соотношение пиков осталось прежним.

Была проведена теоретическая оценка времени жизни апоферритина на основе энергии водородных связей. Вероятность отделения одной субъединицы от белковой глобулы  $p_1$  можно оценить как  $p_1 \sim \exp(-NG_H/kT)$ , где  $N$  — количество водородных связей,  $G_H$  — энергия одной водородной связи,  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура. Время жизни  $\tau_1 \sim 1/p_1$  составляет порядка  $10^{16}$  лет. Также была получена оценка времени обмена субъединицами между молекулами апоферритина. Вероятность обмена  $p \sim \left(\frac{8}{24}p_1\right)^2 \cdot l \cdot \pi d^2 n$ ,  $l$  — характерный размер пробирки,  $d$  — диаметр глобулы апоферритина,  $n$  — концентрация молекул апоферритина в пробирке. Время обмена субъединицами  $\tau \sim 1/p$  составляет около  $10^{31}$  лет.

Таким образом, были проведены эксперименты по исследованию возможности обмена субъединицами между глобулами апоферритина на основе рекомбинантных белковых комплексов “FerHis6” и “FerSumoHis6” в характерных условиях для рекомбинантных вакцин. Проведена теоретическая оценка времени обмена субъединицами между глобулами апоферритина, которая показала, что обмен субъединицами при близких к физиологическим условиям маловероятен. Результаты работы подтверждают стабильность глобул рекомбинантных белковых комплексов на основе апоферритина при близких к физиологическим условиям.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-03-2023-106, проект FSMG-2021-0002).

### Литература

1. Zhang Y., Orner B. P. Self-Assembly in the Ferritin Nano-Cage Protein Superfamily // Int. J. Mol. Sci. 2011. V. 12(8). P. 5406–5421.
2. Sudarev V. V. [et al.] Ferritin self-assembly, structure, function, and biotechnological applications // Int. J. Biol. Macromol. 2023. V. 224. P. 319–343.

УДК 577.322.4

## Исследование факторов, влияющих на стехиометрию с-кольца АТФ-синтазы

А. В. Минаева<sup>1</sup>, С. Д. Осипов<sup>1</sup>, В. В. Сударев<sup>1</sup>, А. В. Власов<sup>1,2</sup>, А. И. Куклин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup> Объединенный институт ядерных исследований

АТФ-синтаза играет ключевую роль в биоэнергетике любого организма. Этот комплекс синтезирует АТФ из АДФ и неорганического фосфата, используя разность концентрации протонов по разные стороны от мембраны, в которую он встроен [1]. Поток протонов производит вращение мембранного домена АТФ-синтазы (ротор  $c_n$ -ринг), что вызывает конформационные изменения в  $F_1$ -части АТФ-синтазы и катализирует синтез АТФ.

Важным биоэнергетическим параметром является соотношение числа синтезированных молекул АТФ к числу протонов, прошедших через с-кольцо, АТФ/ $H^+$ . Этот параметр зависит от числа протомеров  $c_1$ , формирующих кольцо  $c_n$ . В общем виде он равен  $\frac{3}{n}$ . Есть свидетельства [2], что стехиометрия  $c_n$ , т. е. число  $n$ , определяется аминокислотной последовательностью  $c_1$ , однако до сих пор остается ряд открытых вопросов про ключевые детерминанты стехиометрии с-колец. Например, неизвестно, какое влияние на стехиометрию оказывает окружение белка. Для многих живых организмов неизвестна также и стехиометрия  $c_n$ , и существующие алгоритмы (например, AlphaFold) оказались неэффективными в ее предсказании.

В данной работе исследован рекомбинантное с-кольцо из хлоропластов шпината, синтезированный в клетках *Escherichia coli*. Проведена трансформация клеткок *E. coli* TG-1 плазмидой с геном с-кольца, после чего выделены и очищены протомеры  $c_1$ . Белки исследованы биохимическими методами гель-электрофореза и вестерн-блоттинга. Полученные данные свидетельствуют об экспрессии белка  $c_1$  из хлоропластов шпината в клетках *E. coli*. Способы сборки  $c_n$ -кольца в клетках *E. coli* обсуждаются.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 22-74-00044.

## Литература

1. *Vlasov A. V.* [et al.]. Unusual features of the c-ring of F<sub>1</sub>FO ATP synthases // *Sci. Rep.* 2019. V. 9(1): 18547.
2. *Pogoryelov D.* [et al.]. Engineering rotor ring stoichiometries in the ATP synthase // *Proc. of the National Academy of Sciences.* 2012. V. 109(25): E1599–E1608.

УДК 577.112.7

### Разработка и структурные исследования наночастиц вида ферритин–иммуноген

**В. В. Сударев<sup>1</sup>, М. С. Гетте<sup>1</sup>, С. В. Баженов<sup>1</sup>, Ю. Л. Рижиков<sup>1,2</sup>, Т. С. Куркин<sup>1</sup>, Н. А. Бондарев<sup>1</sup>,  
С. Д. Осипов<sup>1</sup>, И. В. Манухов<sup>1</sup>, А. И. Куклин<sup>1,2</sup>, А. В. Власов<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт ядерных исследований

Ферритин — важный железосодержащий белок, встречающийся в большинстве организмов [1]. У людей ферритин служит основным хранилищем железа, связывает токсичные ионы двухвалентного железа (Fe<sup>2+</sup>) и активные формы кислорода (АФК), защищая организм от окислительного стресса [1]. Белок обычно встречается в виде растворимой полой глобулы, а железо хранится внутри белковой полости в виде ферригидрита. Белковая оболочка состоит из 24 гомологичных субъединиц, которые в процессе синтеза случайно соединяются друг с другом, образуя четвертичную глобулярную структуру [1]. Этот процесс, называемый «самосборкой», делает ферритин уникальным инструментом для биотехнологии. Белковую глобулу используют в качестве каркаса для самосборки химерных белковых комплексов. Например, можно создавать химерные рекомбинантные белки, соединяя последовательность ферритина с вирусным антигеном, что приведет к формированию глобулярных белковых вакцин [1, 2]. В этом случае ферритиновая оболочка сама по себе стимулирует иммунный ответ [3]. Такой подход можно использовать для разработки новых вакцин и других препаратов [1].

В работе были получены рекомбинантные белковые комплексы на основе ферритинов из организмов *Helicobacter pylori* и *Escherichia coli*. Конструкции были встроены в вектор pSol SUMO для высокоэффективной экспрессии, каждая из конструкций содержит гистидиновую метку и сайт узнавания протеазы Upr1 для последующей очистки целевых белков методом двойной никель-аффинной хроматографии. Наиболее перспективной для дальнейших иммунологических исследований оказалась конструкция SumoRBDfTnEC — ген ftnA из *E. coli*, слитый N-концевой частью с рецептор-связывающим доменом (RBD) S-белка коронавируса. Экспрессия проводилась в штамме *E. coli* BL21. Проведена очистка целевого белка методом никель-аффинной и гель-фильтрационной хроматографии. Итоговая чистота продукта составила около 90%.

Для конструкции SumoRBDfTnEC проведены структурные исследования методами малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) и электронной микроскопии негативного контрастирования (ПЭМ). Исследования методом МУРР проводились на установке Rigaku MicroMax-007 HF [4] в Московском физико-техническом институте (МФТИ), измерения проводились в течение 4 часов в вакууме при комнатной температуре (22°C). Из данных МУРР определен радиус гирации белковых частиц,  $R_g = 14,6$  нм, а также максимальный размер частицы 495 Å. Исследования методом ПЭМ проводились на установке Tescan Polara G2 в МФТИ, получены микрофотографии объектов шарообразной формы с радиусом около 10 нм.

Полученные данные соответствуют ожидаемому размеру полноразмерных глобулярных белковых комплексов из 24 субъединиц. Таким образом, подтверждена самосборка целевых рекомбинантных химерных белковых комплексов — потенциальных вакцин от SARS-CoV-2.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (договор 075-03-2023-106, проект FSMG-2021-0002).

## Литература

1. *Sudarev V. V.* [et al.]. Ferritin self-assembly, structure, function, and biotechnological applications // *Int. J. Biol. Macromol.* 2022. V. 224. P. 319–343.
2. *Yin S.* [et al.]. A critical review of ferritin as a drug nanocarrier: Structure, properties, comparative advantages and challenges // *Particuology.* 2022. V. 64. P. 65–84.
3. *Tang S.* [et al.]. Versatile functionalization of ferritin nanoparticles by intein-mediated trans-splicing for antigen/adjuvant co-delivery // *Nano Let.* 2019. V. 19(8). P. 5469–5475.

4. Murugova T. N. [et al.]. Low resolution structural studies of apoferritin via SANS and SAXS: The effect of concentration // J. Optoelectron. Adv. Mater. 2015. V. 17(9–10). P. 1397–1402.

УДК 577.22

## Структурно-функциональные исследования LOV-доменов архей

*И. И. Натаров, О. Ю. Семенов, А. А. Ремеева, И. Ю. Гуцин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

LOV (Light Oxygen Voltage) домены являются сенсорами синего света и встречаются в белках представителей всех трех доменов жизни: бактерий, архей и эукариот. В сравнении с бактериальными и эукариотическими гомологами, LOV-домены архей остаются плохо изученными [1]. Таким образом, структурные и функциональные исследования LOV-доменов архей представляют особый научный интерес.

Одной из характеристик белка, важных для практического применения в качестве молекулярного инструмента, является его стабильность в различных условиях, поэтому для разработки термостабильных белков на основе LOV-доменов прилагались значительные усилия [2]. Перспективным представляется исследование LOV-доменов белков термофильных галоархей, таких как *Natrinema sp. CBA1119 (thermophila)* [3] или *Haloterrigena thermotolerans* [4]. Данные архей способны расти при экстремальных температурах (до ~60°C) и высоких концентрациях NaCl (~4 моль на литр); это позволяет предположить, что белки этих организмов будут стабильны в широких диапазонах температур и концентраций солей.

Целью данной работы являются структурно-функциональные исследования LOV-доменов белков галоархей. Для исследования были выбраны белки из четырех представителей галоархей: *Halobacterium salinarum*, *Natrinema sp. CBA1119 (thermophila)*, *Haloterrigena thermotolerans*, *Halanaeroarchaeum sulfurireducens*. В ходе работы были получены белковые препараты высокой степени очистки, изучены спектральные свойства белков и начата работа по кристаллизации. Эксперименты по количественной оценке термостабильности и рефолдинга белка, полученного на основе LOV-домена архей *Halanaeroarchaeum sulfurireducens*, в буферах с значениями pH в диапазоне от 3 до 11 и концентрациями соли в диапазоне от 0,1 М до 4 М NaCl показали, что температура денатурации монотонно возрастает с увеличением концентрации соли (от ~54°C при 0,1 М NaCl до ~65°C при 4 М NaCl), а также что белок наиболее стабилен в нейтральной или слабощелочной среде (оптимальный pH 7–8).

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда, номер гранта 21-64-00018.

### Литература

1. Losi A. [et al.]. The evolution and functional role of flavin — based prokaryotic photoreceptors // Photochem. Photobiol. 2015. V. 91(5). P. 1021–1031.
2. Remeeva A. [et al.]. Effects of proline substitutions on the thermostable LOV domain from *Chloroflexus aggregans* // Crystals. 2020. T. 10(4): 256.
3. Kim Y. B. [et al.]. Novel haloarchaeon *Natrinema thermophila* having the highest growth temperature among haloarchaea with a large genome size // Sci. Rep. 2018. V. 8(1): 7777.
4. Montalvo-Rodríguez R. [et al.]. *Haloterrigena thermotolerans* sp. nov., a halophilic archaeon from Puerto Rico // Int. J. Syst. Evol. Microbiol. 2000. V. 50(3). P. 1065–1071.

## The influence of Earth orbit microgravity and high magnetic field on protein atomic structure

*C. MacCarthy*<sup>1</sup>, *E. Koudan*<sup>2</sup>, *M. Shevtsov*<sup>1</sup>, *Yu. Khesuan*<sup>3</sup>, *V. Borshchevskiy*<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Research Centre for Molecular Mechanisms of Ageing and Age-Related Diseases,  
Moscow Institute of Physics and Technology

<sup>2</sup>Center for Biomedical Engineering, National University of Science and Technology "MISIS"

<sup>3</sup>Laboratory of Biotechnological Research "3D Bioprinting Solutions"

<sup>4</sup>Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna

Protein structure can be determined using crystallisation and X-ray diffraction, which is a useful method for revealing structure-function relations crucial for comprehending protein function in biological systems. Protein crystals of the highest quality are necessary for X-ray crystallography. However, the formation of diffraction-quality crystals remains the main obstacle, impeding the identification of many important proteins, despite the fact that enormous efforts have been made to research protein crystal development. Given that the procedure heavily relies on screening hundreds to thousands of conditions, it is challenging to anticipate the crystallisation conditions for proteins.

Protein crystallisation studies in Earth orbit's microgravity, where convection and sedimentation are less influenced by buoyancy, favour the formation of high-quality crystals. Despite this innovative approach to obtaining high-quality protein structures, the results remain unclear (Giegé, 2013).

Magnetic levitation is an alternative way to enhance quality crystal growth in space. In this method, protein crystals grow in a more regulated high magnetic gradient. In our work, a strong magnetic field in low Earth orbit microgravity was used to improve the development of protein crystals of high quality. Crystals' diffraction data collected at a synchrotron radiation source with ultrahigh resolution are to be reduced, and the atomic models of proteins are to be solved with a resolution  $\sim 1\text{\AA}$ .

This study will show for the first time how the combination of a strong magnetic field and Earth's orbital microgravity modify protein structure with atomic details, which may be of use for space medicine and bioastronautics.

Synchrotron data collection and treatment were supported by the Russian Ministry of Science and Higher Education (Grant No. 075-15-2021-1354).

### References

1. *Giegé R.* A historical perspective on protein crystallization from 1840 to the present day // FEBS J. 2013. V. 280(24). P. 6456–6497. DOI: 10.1111/febs.12580.

УДК 577.322.6

## Уточнение природы атомов раствора в белковых кристаллах с использованием машинного обучения

*Х. С. Мустафин*<sup>1</sup>, *И. Ю. Гуцин*<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Количество экспериментально определенных структур биологических молекул в PDB в настоящее время превышает 200 000; большинство из них получены при помощи рентгеновской кристаллографии. Существует широкий спектр компьютерных методов, которые упрощают и ускоряют процесс определения структуры белков [1]. Однако некоторые задачи требуют осторожного подхода в интерпретации результатов кристаллографии.

Ярким примером является проблема моделирования компонентов раствора в белковых кристаллах. Среда, в которой выращивается кристалл белка, неизбежно содержит не только воду, но также ионы, лиганды и другие малые молекулы. В среднем около половины всего объема кристалла занято раствором [2]. Неточная интерпретация электронной плотности компонентов раствора, особенно вблизи поверхности белка, может привести к некорректным выводам о физико-химических свойствах биомолекул. Даже малые его компоненты, такие как ионы хлора, могут играть важную роль в функционировании белка и быть неотъемлемой частью его структуры. При этом некоторые атомы и молекулы имеют похожую

электронную плотность. В частности, ионы хлора имеют низкий аномальный сигнал, и их легко спутать с молекулами воды [3].

В данной работе мы исследовали возможность классификации молекул воды и ионов хлора в кристаллографических структурах белков с использованием моделей машинного обучения. Мы представляем автоматизированный подход, с помощью которого нами были обнаружены кристаллографические структуры, в которых некорректно проаннотированы ионы хлора.

### Литература

1. *Wlodawer A.* [et al.]. Protein crystallography for aspiring crystallographers or how to avoid pitfalls and traps in macromolecular structure determination // *FEBS J.* 2013. V. 280(22). P. 5705–5736.
2. *Weichenberger C. X.* [et al.]. The solvent component of macromolecular crystals // *Acta Crystallogr., Sect. D: Biol. Crystallogr.* 2015. V. 71(5). P. 1023–1038.
3. *Skitchenko R. K.* [et al.]. Census of halide-binding sites in protein structures // *Bioinformatics.* 2020. V. 36(10). P. 3064–3071.

УДК 577.112.4

### Подготовка образцов рецепторов, сопряженных с G-белком, для исследования их структурной динамики методом одномолекулярной FRET-микроскопии

*И. А. Капранов, П. А. Хорн, И. В. Маслов, А. П. Лугинина, А. В. Мишин, В. И. Борщевский*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рецепторы, сопряженные с G-белком (GPCR) — многочисленное семейство мембранных белков (6 классов, более 800 членов), специфически связывающих разнообразные сигнальные молекулы, регулируя таким образом биохимические и физиологические процессы. Нарушения в работе данных рецепторов могут приводить к серьезным заболеваниям, поэтому GPCR представляют собой самый большой класс мишеней для лекарственных препаратов (более 34% лекарственных препаратов на фармацевтическом рынке [1]), а структурно-функциональные исследования этих рецепторов являются актуальными не только для фундаментальной, но и для прикладной науки.

Важной задачей в понимании механизмов работы рецептора является исследование его конформационной динамики — пространственного изменения структуры белка во времени в ответ на присоединение лиганда. Далеко не все современные методы структурной биологии позволяют проследить структурные изменения во времени, поэтому одним из перспективных методов изучения молекулярной динамики белков является одномолекулярная FRET-микроскопия (smFRET). Данный подход основан на явлении резонансного переноса энергии, испускаемой флуоресцентной меткой-донором, на метку-акцептор, что приводит к возникновению сигнала флуоресценции второй. Данное явление наблюдается только при перекрывании спектров эмиссии метки-донора и поглощения метки-акцептора, а эффективность переноса зависит от расстояния между молекулами красителей. Таким образом, располагая метки на подвижных частях исследуемого белка, мы можем наблюдать за его конформационными изменениями в ответ на различные лиганды.

Для применения данной методики к GPCR мы выбрали целью рецептор, играющий ключевую роль в поддержании кровяного давления в организме, удержанию воды и ионов натрия в крови и в осуществлении контроля за диаметром кровеносных сосудов. Было показано, что нарушения в работе данного рецептора приводят к ряду серьезных заболеваний, начиная от гипертонии и заканчивая инсультом, и возникновению аневризм кровеносных сосудов. Несмотря на то, что для данного белка получена структура, многие вопросы, связанные с его работой, до сих пор остаются без ответа. Можно сделать вывод, что данный рецептор является интересной и перспективной целью исследования в рамках анализа его структурной динамики и понимания механизмов его работы, а потенциальные результаты могут быть полезны при создании новых лекарств, направленных на выбранный рецептор.

В данной работе мы провели широкий спектр экспериментов по созданию протокола наработки исследуемого белка, а также решили проблемы оптимизации процедур выделения и очистки. Полученные методики позволили наладить стабильную экспрессию и получение функционального белка дикого типа. Нами были разработаны и получены мутантные конструкции, которые в дальнейшем будут использоваться для одномолекулярной FRET-микроскопии. Данные конструкции позволят протестировать и выбрать лучший метод флуоресцентного мечения и определить, насколько внесенные мутации влияют на



функциональность белка. Последним подготовительным шагом для проведения микроскопии является оптимизация сборки нанодисков — мембраномоделирующей системы, необходимой для стабилизации рецептора в растворе на время проведения экспериментов.

Выражаем благодарность за поддержку работы Министерству науки и высшего образования Российской Федерации (075-03-2023-106, 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. 2017. V. 16(12). P. 829–842. DOI:10.1038/nrd.2017.178.

УДК 533.922

## Эволюционные методы оптимизации при расчетах оптических свойств органических пигментов

В. А. Курков<sup>1</sup>, Д. Д. Чесалин<sup>2</sup>, Р. Ю. Пищальников<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН

В данной работе на примере моделирования оптического отклика молекул фотосинтетических пигментов бактериохлорофилла и каротиноидов в различных растворителях мы демонстрируем уникальные возможности эволюционного метода оптимизации, известного как дифференциальная эволюция [1]. Используемый метод является стохастическим многопараметрическим алгоритмом математической оптимизации, в работе которого реализованы принципы естественного отбора и селекции, необходимые для приспособления организмов к изменениям окружающей среды. Объединение в единую программу процедур расчета оптического отклика и оптимизационного алгоритма позволило нам с высокой точностью подогнать экспериментальные данные и разработать полуклассическую квантовую теорию, ключевым фактором которой является понятие спектральной плотности, с помощью которой можно рассчитывать спектры разрешенных электронных состояний любых органических пигментов [2].

Спектры поглощения электронных возбужденных состояний с учетом взаимодействия с вибранными модами атомарного остова пигментной молекулы вычислялись на основе следующих выражений [2]:

$$\Sigma_{abs}(\omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega - \Omega_{eg})t} e^{-g(t)} e^{-\frac{1}{2}(\Delta t)^2}, \quad (1)$$

где  $\Omega_{eg}$  — энергия электронного перехода из основного состояния  $|g\rangle$  в возбужденное  $|e\rangle$ ;  $\Delta = \text{FWHM}/2\sqrt{2 \cdot \ln 2}$  — величина стандартного отклонения распределения Гаусса, моделирующего неоднородное уширение спектра, которое является следствием взаимодействия ближайшего окружения пигментной молекулы с ее электронным состоянием;  $g(t)$  — функция профиля линии, которая зависит от набора вибранных мод и их интенсивности взаимодействия с электронным возбуждением. В общем виде она записывается следующим образом:

$$g(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1 - \cos \omega t}{\omega^2} \coth(\beta \hbar \omega / 2) C''(\omega) - \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\sin(\omega t) - \omega t}{\omega^2} C''(\omega), \quad (2)$$

где  $C''(\omega)$  — спектральная плотность, которая определяется набором параметров  $\{\omega_j, S_j, \gamma_j\}$ :  $\omega_j$  — частота  $j$ -й моды,  $S_j$  — эффективный параметр взаимодействия электронного состояния с колебательным (Хуанг–Рис фактор),  $\gamma_j$  — параметр затухания  $j$ -й моды:

$$C''(\omega) = \sum_j \frac{2S_j \omega_j^3 \omega \gamma_j}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \gamma_j^2}. \quad (3)$$

Таким образом, для того чтобы рассчитать теоретический спектр электронного поглощения, нам необходимо подобрать параметры  $\Omega_{eg}$ ,  $\Delta$ , и  $\{\omega_j, S_j, \gamma_j\}$ , подставляя их в уравнения (1), (2) и (3). Подбор осуществляется с помощью алгоритма дифференциальной эволюции при оценке теоретического и расчетного спектров с помощью функции невязки:

$$\chi^2(x_i) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (I(\omega_n) - \sigma_{abs}(\omega_n, x_i))^2, \quad (4)$$

где  $x_i$  — параметры квантовой модели ( $\Omega_{eg}$ ,  $\Delta$ ,  $\{\omega_j, S_j, \gamma_j\}$ ), подающиеся на вход оптимизационного алгоритма. Для расчета спектра бактериохлорофилла в формуле (3) использовалось 18 вибронных мод, а для спектра сфероидена было достаточно 8.

На рис. 1 и 2 представлен результат работы оптимизации для экспериментальных спектров бактериохлорофилла и сфероидена.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-21-00905.

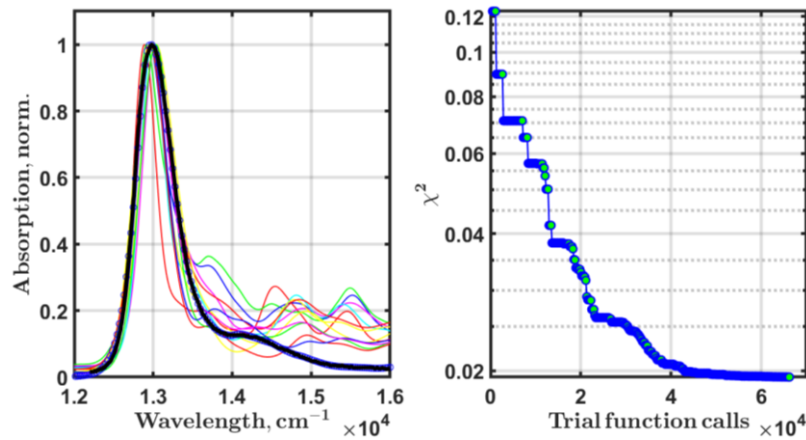


Рис. 1. Демонстрация моделирования спектра поглощения молекулы бактериохлорофилла *a* в этаноле. Слева показана динамика изменения расчетных спектров в процессе работы оптимизационного алгоритма (тонкие цветные линии соответствуют первым десяти расчетным спектрам). Толстой линией обозначен экспериментальный спектр, а линия с маркерами соответствует лучшему найденному решению. Справа — изменение функции невязки (4) от количества вызовов расчетной процедуры

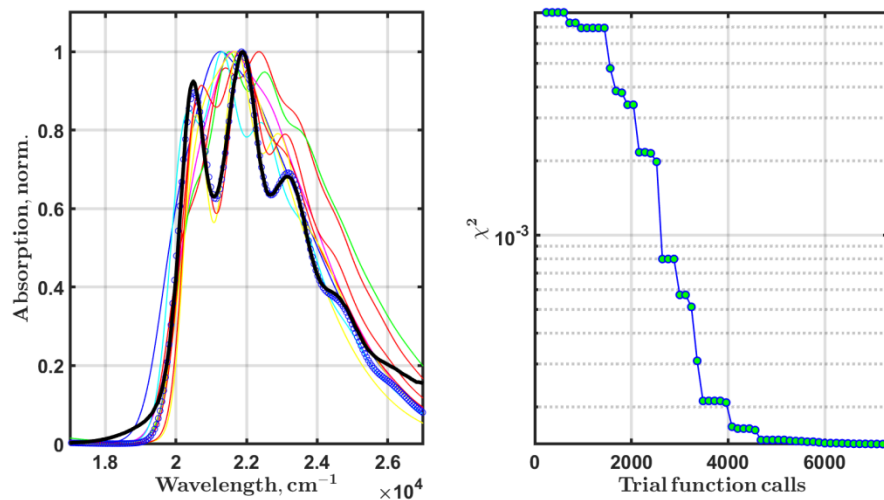


Рис. 2. То же, что на рис. 1, однако в качестве экспериментальных данных использован спектр поглощения сфероидена

### Литература

1. *Storn R., Price K.*, Differential evolution — A simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces// *J. Global Optim.* 1997. V. 11. P. 341–359.
2. *Chesalin D. D.* [et al.]. Differential evolution reveals the effect of polar and nonpolar solvents on carotenoids: A case study of astaxanthin optical response modeling// *Swarm Evol. Comput.* 2022. V. 75: 101210.

## Исследования пространственной организации доменов архитектурных белков эукариот методами рентгеноструктурного анализа и электронной микроскопии

*А. Д. Бурцева<sup>1,2</sup>, А. В. Моисеенко<sup>3</sup>, А. Ю. Николаева<sup>4</sup>, А. Н. Бончук<sup>5</sup>, К. М. Бойко<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт биохимии им. А. Н. Баха,

Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН

<sup>3</sup>Биологический факультет, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

<sup>4</sup>Комплекс НБИКС-природоподобных технологий, НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>5</sup>Центр высокоточного редактирования и генетических технологий для биомедицины,

Институт биологии гена РАН

Архитектурные белки играют критическую роль в трехмерной организации генома и широко распространены у эукариот. Известно, что нарушения в работе таких белков приводят к серьезным патологическим состояниям, например к онкогенным хромосомным перестройкам. Белки с мотивом «цинковые пальцы» (ZFP), в которых 4 остатка цистеина и/или гистидина координируют ион цинка, являются самым большим семейством транскрипционных факторов (ТФ) с ДНК-связывающими доменами [1]. Функции этих белков необычайно разнообразны и включают распознавание и упаковку нуклеиновых кислот, активацию транскрипции, регуляцию апоптоза, сворачивание и сборку белков, а также связывание с липидами [2]. ZFP эукариот помимо доменов, необходимых для связывания с ДНК, часто содержат дополнительные функциональные домены, служащие в том числе для белок-белковых взаимодействий. К таким доменам относятся, в частности, домены BTV (Broad-Complex, Tramtrack и Bric-a-brac) и ZAD (Zinc-finger Associated Domain).

ZAD-домены, широко распространенные у членистоногих, имеют низкое сходство первичных последовательностей и существуют исключительно в форме гомодимеров [3]. Единственная ранее установленная структура такого домена из белка Grauzone содержит две почти перпендикулярные  $\alpha$ -спирали ( $\alpha 1$  и  $\alpha 2$ ), два антипараллельных  $\beta$ -листа и множество петлевых областей, фиксируемых ионом цинка. Данный ион координирован четырьмя остатками цистеина, которые являются единственными инвариантными остатками в последовательностях ZAD-доменов. Отсутствие других структур ZAD-доменов и низкая гомология по первичной последовательности ставит вопрос о каноничности пространственной организации ZAD-доменов и факторах, определяющих специфичность их димеризации.

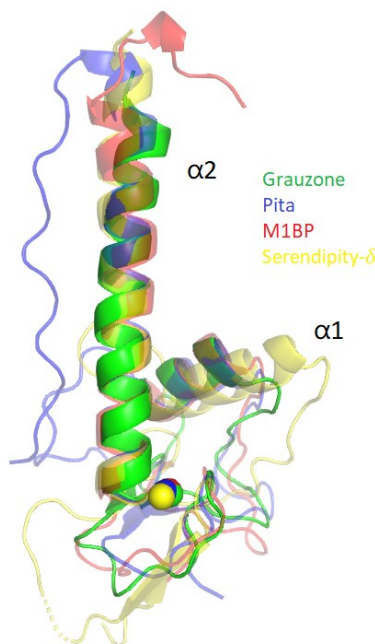


Рис. 1. Суперпозиция структур субъединиц ZAD-доменов белков Grauzone (показан зеленым цветом), Pita (синим), M1BP (красным) и Serendipity- $\delta$  (желтым). Ионы цинка изображены в виде сфер

ВТВ — группа доменов белок-белкового взаимодействия, присутствующих во многих ТФ эукариот. На N-конце многих доменов этой группы, в частности, у белков LOLA и CG6765, обнаружен характерный ТТК (Gramtrack) мотив. Известно, что ВТВ-домены типа ТТК способны образовывать мультимеры высокого порядка, в отличие от типичных представителей ВТВ-доменов, являющихся димерами [4]. При этом пространственная архитектура ВТВ-доменов ТТК-типа (mВТВ) и механизм их мультимеризации остаются неизвестными.

Данная работа посвящена исследованию деталей пространственной организации ZAD- и ВТВ-доменов архитектурных белков эукариот методами рентгеноструктурного анализа (РСА) и электронной микроскопии (ЭМ). В рамках данной работы был проведен сравнительный анализ новых кристаллических структур ZAD-доменов белков Pita, M1BP и Serendipity- $\delta$  с единственной известной ранее структурой ZAD-домена Grauzone из *D. melanogaster*. Несмотря на низкое сходство первичных последовательностей, все полученные структуры ZAD-доменов демонстрируют сходную пространственную архитектуру, основными доминантами которой являются две  $\alpha$ -спирали (рис. 1). Проведенный анализ позволил выявить ключевые взаимодействия, определяющие трехмерную укладку субъединицы домена, а также аминокислоты, формирующие димерный интерфейс.

Методом просвечивающей ЭМ (негативное окрашивание) были получены изображения химерных конструкций MBP-LOLA и MBP-CG6765, представляющих собой, соответственно, сшитые с MBP (maltose binding protein) mВТВ-домены белков LOLA и CG6765 из *D. melanogaster*. Проведена обработка ЭМ данных и выявлены двумерные классы проекций, демонстрирующие гексамерную организацию данных белков (рис. 2), что согласуется с полученными ранее данными SAXS и MALS. Также получены кристаллы mВТВ-домена белка CG6765, которые дифрагировали до  $\sim 9$  Å. В настоящее время проводится работа по оптимизации условий кристаллизации данного домена для дальнейших структурных исследований высокого разрешения.

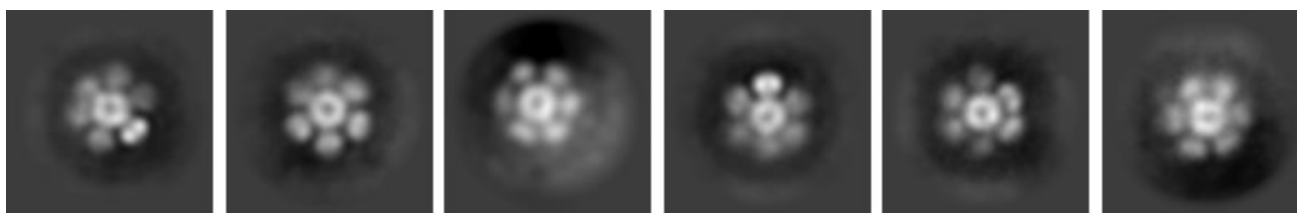


Рис. 2. Двумерные классы проекций для конструкта MBP-CG6765, демонстрирующие гексамерные структуры. Диаметр частиц  $\sim 200$  Å

### Литература

1. *Cassandri M.* [et al.]. Zinc-finger proteins in health and disease // *Cell Death Discovery*. 2017. V. 3: 17071.
2. *Laity J. H., Lee B. M., Wright P. E.* Zinc finger proteins: new insights into structural and functional diversity // *Curr. Opin. Struct. Biol.* 2001. V. 11. P. 39–46.
3. *Bonchuk A. N.* [et al.]. Structural insights into highly similar spatial organization of zinc-finger associated domains with a very low sequence similarity // *Structure*. 2022. V. 30. P. 1004–1015.
4. *Bonchuk A., Denisov S., Georgiev P., Maksimenko O.* Drosophila ВТВ/POZ domains of “ttk group” can form multimers and selectively interact with each other // *J. Mol. Biol.* 2011. V. 412. P. 423–436.

УДК 577.322.23

### Применение флуоресцентных методов для изучения взаимодействия GPCR-лиганд

*Д. Е. Дашевский, А. П. Лугинина, П. А. Хорн, И. В. Маслов, В. И. Борщевский, А. В. Мишин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рецепторы, сопряженные с G-белком (GPCR), являются одновременно и самыми распространенными мембранными белками человека и самыми популярными лекарственными мишенями, так как эти рецепторы участвуют в передаче сигналов в большинстве физиологических процессов организма. Одними из важнейших задач в области изучения GPCR являются поиск и описание взаимодействия новых лигандов, характеристика влияния аллостерических модуляторов, а также изучение воздействия мутаций на функциональность рецептора [1]. Решение этих задач не только лежит в основе разработки

лекарственных препаратов, но и составляет существенную часть фундаментальных биофизических исследований. Используемые в настоящее время методы для анализа взаимодействия GPCR и лигандов, такие как радиолигандный анализ и клеточные функциональные тесты, подразумевают применение дорогостоящего оборудования и материалов, высокого мастерства владения методом и длительных исследований для каждого уникального рецептора. В свою очередь, легко реализуемой альтернативой могут стать методы, основанные на измерении флуоресценции, например анализ термостабильности (TSA) [2] и микромасштабный термофорез (MST) [3].

TSA основан на измерении кривой плавления, которая отображает зависимость доли расплавленного белка от температуры раствора. Количество белка в расплавленном состоянии определяется либо по флуоресценции собственных триптофанов в случае наноразмерной сканирующей флуорометрии (nanoDSF), либо по флуоресценции красителя, реагирующего на денатурацию белка. Константа диссоциации ( $K_d$ ) комплекса белок–лиганд рассчитывается из величины сдвига кривой плавления в область более высоких температур, который происходит при добавлении лиганда в раствор и стабилизации белка за счет образования комплекса. В методе MST  $K_d$  определяется по изменению гидродинамического радиуса молекулы белка, который происходит вследствие образования комплекса с лигандом. Детекция изменения подвижности белка осуществляется за счет наблюдения за флуоресценцией метки, прикрепленной к молекуле рецептора.

Для методов MST и TSA (nanoDSF и в присутствии красителя 7-диэтиламино-3-(4'-maleimidylfenil)-4-метилкумарина — CPM) был проведен подбор условий эксперимента. Для подхода TSA/CPM была сформирована и апробирована математическая модель обработки данных. В результате проделанной работы для аденозинового рецептора второго типа ( $A_{2A}AR$ ) методом TSA были получены  $K_d$  для ряда ортостерических и аллостерических лигандов. Значения констант для ортостерических лигандов близки к известным из литературы и измеренным методом радиолигандного анализа, что подтверждает возможность использования TSA в качестве альтернативного метода.

При помощи MST были проведены аналогичные измерения, а также получена  $K_d$  для пептида на основе  $G\alpha_s$  субъединицы. Однако было показано, что для измерения взаимодействий GPCR малая молекула MST и nanoDSF не обладают достаточно высокой чувствительностью.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 22-74-00024.

### Литература

1. *Wacker D., Stevens R. C., Roth B. L.* How Ligands Illuminate GPCR Molecular Pharmacology // Cell. 2017. V. 170(3). P. 414–427.
2. *Alexandrov A. I.* [et al.]. Microscale Fluorescent Thermal Stability Assay for Membrane Proteins // Structure. 2008. V. 16(3). P. 351–359.
3. *Seidel S. A. I.* [et al.]. Microscale thermophoresis quantifies biomolecular interactions under previously challenging conditions // Methods. 2013. V. 59(3). P. 301–315.

---

# Секция проблем квантовой физики, электрофизики, квантовой радиофизики и проблем физики и астрофизики

---

Председатель: Н. Н. Колачевский (д. ф.-м. н., член-корреспондент РАН)

Зам. председателя: С. Ю. Савинов (д. ф.-м. н., доцент), В. С. Лебедев (д. ф.-м. н., профессор)

Секретарь: К. С. Кислов

---

Дата: 04.04.2023

Время: 11:00

УДК 535.8

## Оптическая накачка на центральный магнитный подуровень с использованием предварительного глубокого лазерного охлаждения тулия

*М. О. Яушев, Д. И. Проворченко, Д. А. Мишин, Д. О. Трезубов, А. А. Головизин*

Физический институт им. П. Н. Лебедева

Современные стандарты частоты перешагнули через уровень точности в несколько единиц  $10^{-18}$ , что открывает большие перспективы для использования таких сверхточных часов не только для тестирования фундаментальных теорий, но и для прикладных задач, например в геодезии и навигации [1, 2]. В настоящее время много усилий направлено на создание компактных переносных оптических часов, имеющих высокую надежность и требующих малого времени усреднения для проведения прецизионных измерений в полевых условиях. Тулий является одним из перспективных элементов для создания транспортируемых оптических часов [3–5]. Одной из важных особенностей тулия является возможность проведения одновременного опроса двух часовых переходов  $|g, F=4, m_F=0\rangle \rightarrow |c, F=3, m_F=0\rangle$  и  $|g, F=3, m_F=0\rangle \rightarrow |c, F=2, m_F=0\rangle$  [6]. В работе [7] мы продемонстрировали охлаждение тулия до 400 нК на узком переходе с длиной волны 506 нм и шириной 7,8 кГц, что позволит загружать оптическую решетку в основное колебательное состояние, при этом атомы накапливаются на подуровне  $m_F=-4$ . Использование текущей схемы оптической накачки [8] в такой системе приведет к сильному нагреву атомов и большим потерям, что фактически устраняет преимущества глубокого охлаждения.

В данной работе предлагается новая схема подготовки атомов одновременно в двух начальных состояниях, основанная на когерентном переносе населенности из крайнего магнитного подуровня на центральный, при котором отсутствует нагрев атомов из-за спонтанного распада. Результаты проведенного моделирования показывают, что эффективность накачки превышает 90%. Дальнейшее распределение между сверхтонкими подуровнями можно осуществить с помощью микроволнового или рамановского перехода без нагрева.

### Литература

1. *Bongs K.* [et al.]. Taking atom interferometric quantum sensors from the laboratory to real-world applications // *Nat. Rev. Phys.* 2019. V. 1(12). P. 731–739.
2. *Ludlow A. D.* [et al.]. Optical atomic clocks // *Rev. Mod. Phys.* 2015. V. 87(2): 637.
3. *Golovizin A.* [et al.]. Inner-shell clock transition in atomic thulium with a small blackbody radiation shift // *Nat. Commun.* 2019. V. 10(1): 1724.
4. *Golovizin A.* [et al.]. Compact magneto-optical trap of thulium atoms for a transportable optical clock // *Opt. Express.* 2021. V. 29(22). P. 36734–36744.
5. *Golovizin A. A.* [et al.]. A control unit for the thulium optical clock // *Instrum. Exp. Tech.* 2022. V. 65(6). P. 896–902.
6. *Golovizin A. A.* [et al.]. Simultaneous bicolor interrogation in thulium optical clock providing very low systematic frequency shifts // *Nat. Commun.* 2021. V. 12(1): 5171.
7. *Provorchenko D.* [et al.]. Deep laser cooling of thulium atoms to sub- $\mu$ K temperatures in magneto-optical trap // *Atoms.* 2023. V. 11(2): 30.

8. *Fedorova E.* [et al.], Simultaneous preparation of two initial clock states in a thulium optical clock // *Phys. Rev. A*. 2020. V. 102(6): 063114.

УДК 535.8

## Сложная система наведения для открытого воздушного канала передачи высокостабильной оптической частоты

*А. Д. Легошин<sup>1</sup>, К. А. Лискова<sup>1</sup>, К. С. Кудяров<sup>2</sup>, Г. А. Вишнякова<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Доклад посвящен разработке сложной (состоящей из грубой и точной) системы наведения (компенсации угла) воздушной линии длиной 230 см для передачи высокостабильной оптической частоты. Активная компенсация фазовых шумов при полностью запущенной системе наведения позволяет подавить временную нестабильность частоты до значений менее  $10^{-18}$  за время усреднения 10 с, при этом расширяя диапазон работы линии при угловом смещении потенциального объекта, принимающего излучение, с 0,3 до 3,15 градуса.

Современные оптические стандарты частоты на основе холодных атомов и ионов обладают относительной нестабильностью на уровне  $10^{-18}$  и ниже [1, 2]. Передача сигналов от такого типа стандартов с помощью радиочастотных методов не может обеспечить нестабильность передачи частоты лучше  $10^{-16}$ . Для решения этой проблемы используют оптические каналы с активной компенсацией фазовых шумов. Глобальная сеть оптических часов, объединенная такими каналами, создаст новые возможности для различных областей науки и технологии, таких как спутниковая навигация, интерферометрия со сверхдлинными базами, релятивистская геодезия, проверка фундаментальных теорий, поиск дрейфа фундаментальных постоянных, темной материи и т. д.

В данном докладе описываются результаты разработки открытого воздушного оптического канала для передачи ультрастабильного сигнала частоты на длине волны 1,5 мкм. Ранее нами была продемонстрирована статичная система длиной 17 м с активной системой стабилизации угла приема и компенсации фазовых шумов [3]. В данной работе представлена ее продвинутая версия, которая отличается более гибкой системой стабилизации угла, позволяющей динамически устойчиво и в большем диапазоне следить за движущимся объектом для непрерывной передачи на него стабилизированного сигнала.

Реализованная система наведения состоит из: 1) гальванического зеркала с двухосевым приводом, установленного на оптическом терминале, подающем излучение на «получателя» — так называемая система «точного» наведения; 2) динамического штатива (монтажной), на котором закреплен сам оптический терминал — система «грубого» наведения. Обратная связь обеспечивается позиционно-чувствительным фотодетектором на основе части излучения, отраженного на стороне «получателя» и принятого «отправителем».

Была проведена экспериментальная оценка эффективности разработанной системы для наведения открытого оптического канала передачи ультрастабильного сигнала частоты. Сделан вывод о наличии положительного влияния на обеспечение высокой стабильности передачи сигнала в целом, в особенности при видимых смещениях приемника. При отключении подсистем наведения диапазон работы системы был ограничен угловым смещением отражателя в 0,3 градуса. Включение подсистемы точного наведения расширило диапазон работы до 0,76 градуса, а при включении обеих подсистем сигнал частоты успешно передавался при максимально возможном смещении — 3,15 градуса. Результаты экспериментов показали, что частота переданного сигнала сохраняла относительную нестабильность менее  $10^{-18}$  при усреднении за 10 с. В совокупности с результатами, полученными нами ранее при характеристике статичной модификации оптического канала на больших временах до 5000 с [3], можно сделать вывод, что данная система является перспективной для сличения современных оптических стандартов частоты.

Сделан существенный шаг для реализации модели линии, где в качестве получателя сигнала выступает БПЛА. В качестве ближайших планов рассматривается существенное увеличение длины линии.

Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 19-72-10166).

### Литература

1. *Oelker E., Hutson R. B., Kennedy C. J.* [et al.], Optical clock intercomparison with  $6 \cdot 10^{-18}$  precision in one hour // *Nat. Photonics*. 2019. V. 13. P. 714–719.

2. Brewer S. M., Chen J.-S., Hankin A. M. [et al.].  $^{27}\text{Al}^+$ Quantum-Logic Clock with a Systematic Uncertainty below  $10^{-18}$ // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 123:033201.
3. Vishnyakova G. A., Kudiyarov K. S. [et al.]. Ultra-stable atmospheric short link for the optical frequency signal transfer//2021 Joint Conference of the European Frequency and Time Forum and IEEE International Frequency Control Symposium (EFTF/IFCS). — IEEE, 2021. DOI: 10.1109/EFTF/IFCS52194.2021.9604310.

УДК 535.58

## Связь геометрии непланарной ячейки молекулярного агрегата с его поляризованным спектром поглощения

С. С. Моритака<sup>1,2</sup>, А. Д. Кондорский<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Молекулярные агрегаты органических красителей демонстрируют уникальные физико-химические свойства, из-за которых их продолжают активно исследовать на протяжении почти столетнего периода (см. обзор [1]). В последние годы наблюдается повышенный интерес к изучению оптических свойств молекулярных агрегатов, содержащих непланарные молекулы в элементарной ячейке [2, 3]. Подобные системы являются востребованными в современной фотонике, оптоэлектронике и медицине (см. обзор [4]). Развитые методы изготовления молекулярных агрегатов позволяют определенным образом ориентировать их на подложке, так что получающиеся пленки проявляют ярко выраженную анизотропию [5, 6]. Однако на сегодняшний день отсутствует наглядное объяснение и надежное количественное описание связи поляризованных спектров поглощения с непланарной геометрией ячейки молекулярного агрегата. Основная цель данной работы состоит в установлении такой связи и в разработке надежного и эффективного подхода для расчета поляризованных спектров поглощения такого рода молекулярных агрегатов красителей.

Теоретический анализ анизотропии поглощения линейного агрегата проводился в рамках модели одномерной цепочки с двумя одинаковыми молекулами в элементарной ячейке. Учитывалось, что внутри ячейки есть угол между дипольными моментами перехода молекул. Спектры поглощения рассчитывались для двух случаев, когда линейная поляризация света была направлена параллельно или перпендикулярно оси агрегата. Было проведено сравнение результатов расчетов, выполненных в рамках такой модели, с традиционной моделью линейного агрегата, содержащего одну молекулу в элементарной ячейке. Обнаружено, что введение в рассмотрение угла между дипольными моментами молекул приводит к значительному изменению расчетного спектра поляризованного поглощения по сравнению со случаем, описываемым в рамках традиционной модели МакРея и Каша [7]. При этом было установлено, что структура экситонной зоны изменяется менее существенно. В целях наглядного сопоставления геометрии системы с анизотропией экситонная зона J-агрегата была рассчитана лишь при учете взаимодействия соседних молекул.

Традиционная модель с одной молекулой в элементарной ячейке была проанализирована как предельный случай предложенной здесь более общей модели, при которой ориентации обеих молекул в элементарной ячейке одинаковые. Тогда в спектре поглощения имеется единственная полоса. Ее свойства определяются углом  $\Psi$  между дипольным моментом перехода молекулы и осью агрегата. В общем случае наблюдается частичная деполяризация, но при  $\Psi = 0^\circ$  полоса полностью поляризована параллельно оси агрегата, а при  $\Psi = 90^\circ$  она полностью поляризована перпендикулярно оси. Помимо степени поляризации спектров поглощения, угол  $\Psi$  оказывает сильное влияние на положение максимума полосы. В литературе распространено значение магического угла, равное  $54,7^\circ$  [7]. В случае, когда значение  $\Psi$  меньше магического угла, максимум поглощения сдвигается в длинноволновую область, что характерно для J-агрегатов. В противоположном случае максимум поглощения сдвигается в коротковолновую область, что характерно для H-агрегатов.

Проведенный в работе анализ позволил установить характер зависимости спектра поляризованного поглощения от угла развертки  $\phi$ , отсчитываемого между проекциями двух дипольных моментов в элементарной ячейке на плоскость, перпендикулярную оси агрегата. Увеличение этого угла приводит к эффективному перераспределению силы осциллятора перехода в противоположный край экситонной зоны. Суммарная сила осциллятора остается постоянной. Таким образом возникает и постепенно усиливается дополнительная полоса поглощения, поляризованная перпендикулярно первой полосе. При этом степень



поляризации первой полосы поглощения, если она была частично деполаризована, увеличивается. Кроме того, было обнаружено, что если элементарная ячейка не является планарной, то величина магического угла отличается от значения в  $54,7^\circ$  и увеличивается по мере роста угла развертки  $\phi$ . Когда угол развертки превосходит  $90^\circ$ , то параллельно поляризованная полоса поглощения всегда оказывается сдвинутой в длинноволновую область, независимо от значения угла  $\Psi$ . На рис. 1 приведены примеры расчетных спектров поглощения для заданного угла  $\Psi = 45^\circ$  и трех значений угла  $\phi = 0^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ .

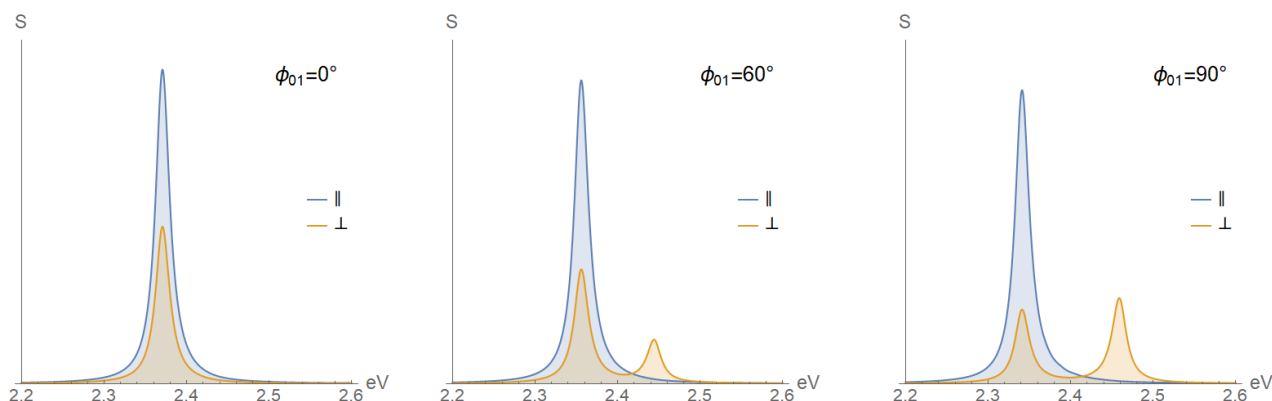


Рис. 1. Поляризованные спектры поглощения для значений угла  $\phi = 0^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ . Голубым цветом обозначено поглощение света, поляризованного параллельно оси агрегата. Оранжевым цветом обозначено поглощение света, поляризованного перпендикулярно оси агрегата

В результате проведенного рассмотрения, базирующегося на предложенной простой модели, было сделано два основных вывода относительно связи оптических свойств молекулярных агрегатов с непланарной геометрией элементарной ячейки. Во-первых, было показано, что такая структура агрегата приводит к возникновению дополнительной полосы поглощения с противоположного края экситонной зоны, поляризованной перпендикулярно первой полосе (см. рис. 1). Во-вторых, было обнаружено, что при увеличении угла  $\phi$  между проекциями двух дипольных моментов в элементарной ячейке на плоскость, перпендикулярную оси агрегата, значение магического угла  $\Psi$  (разделяющего агрегаты H и J-типов) увеличивается вплоть до  $90^\circ$ , после чего структура молекулярного агрегата соответствует J-типу.

Полученные в работе результаты расширяют традиционные представления о связи оптических свойств молекулярных агрегатов красителей с их структурой и геометрией. Разработанная модель допускает обобщение на структуры более сложной формы. Исследования в этом направлении представляются весьма актуальными из-за особых физико-химических свойств молекулярных агрегатов, благодаря чему они активно применяются для разработки элементной базы органической и гибридной фотоники и оптоэлектроники нового поколения.

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант № 19-79-30086).

### Литература

1. *Hestand N. J., Spano F. C.* Expanded theory of H- and J-molecular aggregates: the effects of vibronic coupling and intermolecular charge transfer // *Chem. Rev.* 2018. V. 118(15). P. 7069–7163.
2. *Ma S., Liu Y., Zhang J., Xu B., Tian W.* Polymorphism-dependent enhanced emission in molecular aggregates: J-aggregate versus X-aggregate // *J. Phys. Chem. Lett.* 2020. V. 11(24). P. 10504–10510.
3. *Lie J., Zhang J., Wang J., Wang D., Yan Y., Huang J., Tang B. Z.* Insights into self-assembly of nonplanar molecules with aggregation-induced emission characteristics // *ACS Nano.* 2022. V. 16(12). P. 20559–20566.
4. *Ma S., Du S., Pan G., Dai S., Xu B., Tian W.* Organic molecular aggregates: From aggregation structure to emission property // *Aggregate.* 2021. V. 2(4): e96.
5. *Roodenko K. [et al.].* Anisotropic optical properties of thin-film thiocarbocyanine dye aggregates // *J. Phys. Chem.* 2013. V. 117(39). P. 20186–20192.
6. *Misawa K., Ono H., Minoshima K., Kobayashi T.* New model of excitonic bands and molecular arrangement of highly oriented J-aggregates in polymer films prepared by a novel method // *J. Lumin.* 1994. V. 60. P. 812–815.
7. *McRae E. G., Kasha M.* Enhancement of phosphorescence ability upon aggregation of dye molecules // *J. Chem. Phys.* 1958. V. 28(4). P. 721–722.

## Получение методом МПЭ короткопериодных сверхрешеток на основе InAs/GaSb

*В. С. Кривобок, Г. Н. Ерошенко, И. И. Минаев*

Физический институт им. П. Н. Лебедева

Короткопериодные сверхрешетки на основе ультратонких слоев InAs/GaSb являются одним из кандидатов на роль фоточувствительных материалов для высокоэффективных фотодетекторов MWIR и LWIR спектральных диапазонов.

Принцип работы таких фотодетекторов основан на поглощении излучения носителями заряда, в результате чего изменяются электрические параметры чувствительной области (например, изменение фототока). Данные изменения могут быть зарегистрированы измеряющими схемами, сформированными на подложке, где расположен сам сенсор. Сенсоры обладают высокой чувствительностью и высокой скоростью отклика.

В данном исследовании проведен цикл работ, направленный на получение отечественных детекторов на основе полупроводниковых сверхрешеток, в том числе получена гетероструктура с компенсацией напряжений за счет внедрения атомарно-тонкого интерфейсного слоя.

Исследуемые в данной работе структуры были выращены на установке молекулярно-лучевой эпитаксии. После подготовки поверхности, гомоэпитаксии буфера GaSb, была проведена работа по поиску оптимальных параметров условий роста слоев InAs на GaSb и GaSb на InAs с учетом компенсации межслойных упругих напряжений. На основе опытных данных были получены первые короткопериодные сверхрешетки второго рода GaSb/InAs (T2SL).

Анализ полученных периодических структур производился с помощью АСМ-изображений, рентгеноструктурного анализа. Таким образом, были подобраны оптимальные условия роста слоев InAs-на-GaSb и GaSb-на-InAs и отработана методика формирования «InSb-подобных» интерфейсов на гетерограницах InAs-на-GaSb и GaSb-на-InAs. Показано, что добавление ~1,5 ML InSb позволяет изменять морфологию поверхности, сохраняя при этом высокое структурное совершенство.

В результате получена короткопериодная сверхрешетка InAs/GaSb, в которой реализована компенсация упругих напряжений за счет формирования атомарно тонкого слоя InSb на InAs/GaSb интерфейсах. Полученные методом молекулярно-пучковой эпитаксии сверхрешетки и их исследования позволяют создать высокоэффективные ИК-детекторы.

Также данное исследование по созданию гетероструктур для многоканальных детекторов ИК-диапазона позволит продвинуться в развитии отечественных компонентов фотосенсорики ИК-диапазона.

## Моделирование ошибки однокубитного рамановского гейта на нейтральных атомах рубидия из-за теплового движения в оптическом пинцете

*М. Ю. Голощанов<sup>1,2,3</sup>, Д. А. Кузьменок<sup>2,4</sup>, И. Б. Бобров<sup>2,4</sup>, С. С. Страуне<sup>2,4,5</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Центр квантовых технологий МГУ им. М. В. Ломоносова

<sup>3</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>4</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

<sup>5</sup>Российский квантовый центр

Квантовые компьютеры представляют большой интерес для решения сложных научных и промышленных задач, требующих больших вычислительных мощностей от классических компьютеров. Чтобы квантовые вычисления были практически полезны, важна масштабируемость квантовой системы, высокая точность элементарных операций (гейтов). Перспективной платформой для реализации квантового компьютера являются массивы нейтральных атомов в оптических ловушках. В работе демонстрируется реализация однокубитного рамановского гейта на нейтральных атомах рубидия, исследуется влияние движения атома в оптическом пинцете на декогеренцию осцилляций Раби. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментом.

В качестве реализации кубита используются сверхтонкие подуровни основного состояния  $^{87}\text{Rb}$ , т. е.  $|0\rangle = |5^2S_{1/2}, F = 1, m_F = 0\rangle$ ,  $|1\rangle = |5^2S_{1/2}, F = 2, m_F = 0\rangle$ . Для приготовления кубита атомы охлаждаются в магнито-оптической ловушке (МОЛ) до температуры порядка 30 мК и локализуются в облаке размером 200 мкм, после чего несколько атомов захватываются оптическим пинцетом с перетяжкой  $\sim 1$  мкм. При правильно подобранных параметрах эксперимента реализуется режим столкновительной блокады, при котором в ловушке может жить не более одного атома. Далее с помощью бихроматического (рамановского) лазера [1] происходит перекачка из  $|5^2S_{1/2}, F = 1, m_F = \pm 1\rangle$  в  $|5^2S_{1/2}, F = 2, m_F = \pm 1\rangle$  с последующей релаксацией в том числе в состоянии  $|0\rangle$ . При многократном повторении перекачки вероятность нахождения атома в  $|0\rangle$  стремится к единице; так инициализируется начальное состояние.

Для реализации однокубитных операций в работе используется рамановское возбуждение осцилляций Раби с помощью двух лазеров, разность частот которых совпадает с частотой перехода между  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$ . Отстройка между лазерами предварительно стабилизируется петлей обратной связи по сигналу биений, стабильность частоты при этом достигает нескольких десятков Гц. Измерение состояния производится дополнительным лазером, который выбивает атом из ловушки, если тот находится в состоянии  $|1\rangle$ . Многократные измерения при фиксированной длительности импульса дают информацию о состоянии системы.

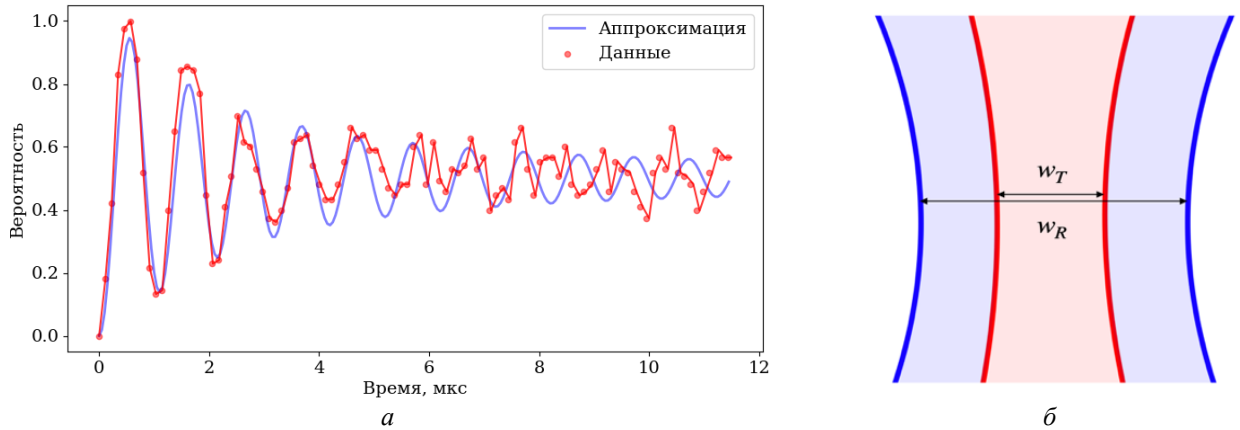


Рис. 1. Рамановский гейт: *a* — вероятность атома остаться в ловушке при взаимодействии с выбивающим пучком от длительности рамановского импульса; *b* — взаимное расположение пучков ловушки и рамановского лазера

Первые полученные результаты показаны на рис. 1*a*. Осцилляции быстро затухают, что может быть вызвано различными процессами декогеренции, среди которых в том числе тепловое движение атома в оптическом пинцете. Из полученного графика нельзя сделать вывод об амплитуде осцилляций Раби, но можно оценить скорость затухания. Для корректной томографии квантового состояния требуется проводить бенчмаркинг, который затруднен быстрым затуханием осцилляций.

Профили оптической ловушки и рамановского лазера соответствуют гауссовским пучкам с перетяжками  $w_T$  и  $w_R$  соответственно (рис. 1*b*), из-за чего в разных точках ловушки получается разная интенсивность излучения. Так как двухфотонная частота Раби пропорциональна интенсивности [2], то при фиксированной длительности импульса возникает зависимость конечного состояния от расстояния до центра пучка. Учет теплового распределения атома в ловушке дает оценку времени когерентности осцилляций от соотношений перетяжек ловушки и рамановского лазера, глубины ловушки и температуры атома. Сигнал, наблюдаемый в эксперименте, можно смоделировать, усреднив осцилляции Раби по частотам. Распределение по частотам Раби при этом определяется тепловым распределением атома в ловушке. Сигнал можно рассчитать по формулам

$$P_{|1\rangle}(t) = \frac{\int_0^\infty \int_0^{v_0} \rho(r, v) \frac{1}{2} \left[ 1 - \cos\left(\Omega_0 \exp\left(-\frac{2r^2}{w_R^2}\right)t\right) \right] r v dv dr}{\int_0^\infty \int_0^{v_0} \rho(r, v) r v dv dr}, \quad (1)$$

$$\rho(r, v) \propto \exp\left[-\frac{U_0}{kT} \left(1 - \exp\left(-\frac{r^2}{w_T^2}\right)\right) - \frac{mv^2}{2kT}\right], \quad (2)$$

$$\frac{mv_0^2}{2kT} + U_0 \left(1 - \exp\left(-\frac{r^2}{w_T^2}\right)\right) = U_0. \quad (3)$$

После численного расчета был проведен эксперимент с большим соотношением перетяжки рамановского лазера к перетяжке ловушки (рис. 2). Неидеальность инициализации и измерения состояния системы приводят к тому, что в начале измерений вероятность в максимуме отличается от единицы. Чтобы учесть это, данные нормируются на  $\sim 0,86$ , за счет чего получается восстановить динамику системы.

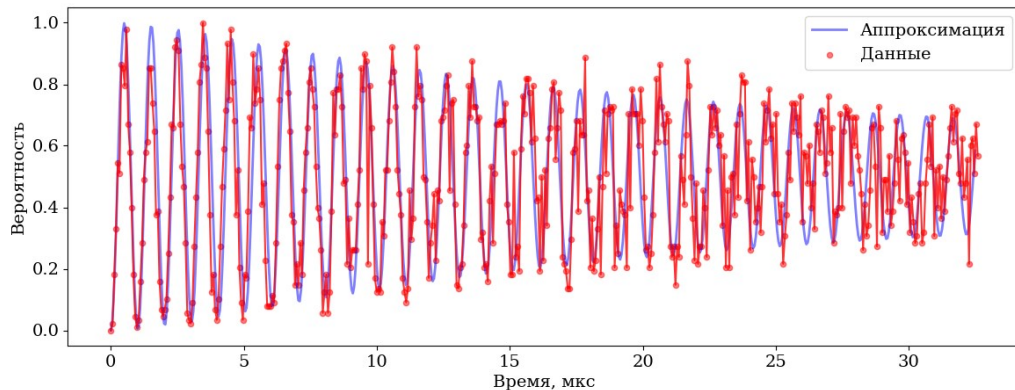


Рис. 2. Динамика населенности возбужденного состояния при больших соотношениях перетяжек. Красным отмечены экспериментальные точки, синим — аппроксимация моделью

Полученная модель хорошо описывает экспериментальные данные (рис. 1а, 2), дает информацию о чувствительности системы к изменению соотношений перетяжек лазеров и температуры атома к глубине ловушки. Моделирование позволило объяснить быстрое затухание осцилляций при малых соотношениях перетяжек, помочь увеличить время когерентности на порядок в новом опыте.

### Литература

1. *Levine H.* [et al.]. Parallel Implementation of High-Fidelity Multiqubit Gates with Neutral Atoms // *Phys. Rev. Lett.* 2019. V. 123(17): 170503.
2. *Steck D. A.* Quantum and atom optics. — Openpub, 2007 [available online at <http://steck.us/teaching>].

УДК 537.56

## Система регистрации заряженных частиц для исследования ультрахолодной плазмы и ридберговских атомов

**С. В. Климов<sup>1,2</sup>, С. А. Саакян<sup>2</sup>, К. П. Галстян<sup>2</sup>, В. А. Саутенков<sup>2</sup>, Б. Б. Зеленер<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

В данной работе рассматривается детектор заряженных частиц и его применение в экспериментах с ультрахолодной плазмой и ридберговскими атомами. Ультрахолодная плазма [1] характеризуется уникальными свойствами, связанными с большим параметром неидеальности (отношение потенциальной энергии частиц к их кинетической энергии) при малой плотности и температуре частиц. Ридберговские атомы — это атомы в высоковозбужденном состоянии с главным квантовым числом  $n > 10$ . Оба объекта могут быть получены экспериментально на базе холодных нейтральных атомов в магнитооптической ловушке и представляют большой интерес для исследователей. Ридберговские атомы, в частности, находят активное применение в задачах квантовой информатики [2].

Свойства ультрахолодной плазмы и ридберговских атомов могут быть установлены из поведения электронов и ионов. Эти частицы возникают при фотоионизации нейтральных атомов как из основного или первых возбужденных, так и из ридберговских состояний. Данный процесс происходит в вакуумной камере, и для регистрации частиц необходима система детектирования.

Детектор, представленный в этой работе, собран из высоковакуумных компонентов и представляет из себя систему из нескольких электродов и системы микроканальных пластин [3]. Заряженная частица в центре вакуумной камеры попадает в электрическое поле, созданное электродами, которое переносит ее на пластину детектора. В результате вторичной электронной эмиссии и дальнейшего усиления

фототока в пластинах возникает короткий (шириной в несколько наносекунд) импульс напряжения. Наблюдая такие сигналы, мы наблюдаем искомые заряженные частицы.

Для интерпретации физических явлений эти полезные сигналы необходимо обработать. Часто для этого используют компаратор, сравнивающий сигнал с заданным порогом и отсеивающий часть флуктуаций. В данной работе роль компаратора выполняет осциллограф Tektronix DPO7054. Этот прибор также уширяет импульсы, делая их удобными для подсчета.

Наконец, необходим непосредственно счетчик сигналов. В данной работе он сделан на основе FPGA NI PCIe-7820R. Эта плата имеет встроенные часы с частотой 40 МГц, что соответствует 25 нс. Для нее было разработано программное обеспечение, позволяющее выводить на экран число сигналов за различные отрезки времени. С поправками на время работы самой программы счетчик регистрирует импульсы шириной от 200 нс, что заметно меньше ширины сигналов, выдаваемых осциллографом.

Полученная система регистрации заряженных частиц используется в экспериментах по изучению свойств ультрахолодной плазмы и ридберговских атомов лития-7.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 21-72-00011). Работа также поддержана грантом Президента РФ по поддержке молодых ученых и ведущих научных школ, проект МК-3869.2022.1.2.

### Литература

1. Zelener B. B. [et al.]. Physical processes during ultracold plasma expansion // Quantum Electron. 2022. V. 52(6). P. 523–527.
2. Saffman M. Quantum computing with atomic qubits and Rydberg interactions: progress and challenges // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2016. V. 49(20): 202001.
3. Wiza J. L. [et al.]. Microchannel plate detectors // Nucl. Instrum. Methods. 1979. V. 162(1–3). P. 587–601.

УДК 535.8

### Потери атомов из большой полой дипольной оптической ловушки

*В. А. Виноградов<sup>1,2,3</sup>, М. В. Платонова<sup>1,3,4</sup>, А. В. Турлапов<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Российский квантовый центр

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт

<sup>3</sup>Институт прикладной физики Российской академии наук

<sup>4</sup>Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

Полая дипольная ловушка может использоваться для удержания большого объема атомного газа, охлажденного до квантового вырождения, в консервативном потенциале. Большое число атомов, охлажденных до температур, близких к абсолютному нулю, необходимо для наблюдения новых фазовых переходов, таких как неоднородная сверхтекучесть Фульде–Феррелла–Ларкина–Овчинникова [1, 2] и спаривание в р-канале по механизму Кона–Латтинжера [3]. Актуальным является вопрос минимизации потерь атомов из ловушки, поскольку время удержания атомов ограничивает время эксперимента.

Исследуемая ловушка имеет форму полого цилиндра и схематично изображена на рис. 1. Было измерено время удержания атомов в этой ловушке, а также установлено, что потери атомов из ловушки определяются нагревом из-за рэлеевского рассеяния.

Потенциал ловушки описывается формулой [4]:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2 \Gamma}{2\omega_0^3(\omega - \omega_0)} I(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где  $\omega$  — частота лазерного излучения,  $\omega_0$  — частота ближайшего перехода в спектре атома,  $\Gamma$  — обратное время жизни возбужденного состояния,  $I$  — интенсивность лазерного излучения.

Для измерения времени удержания через атомы в ловушке проходил импульс подсветки и попадал на камеру, частично поглощаясь атомами. Таким образом на камере получался профиль поглощения, по которому определялось число частиц. Один из таких профилей поглощения приведен на рис. 2. Сделав серию снимков для разных моментов времени, можно построить зависимость числа захваченных частиц от времени. Полученные зависимости для отстроек лучей ловушки 4 ГГц и 2 ГГц от резонанса приведены

на рис. 3а и 3б соответственно. Время удержания для этих отстроек составило 8,4 мс и 5 мс соответственно.

Из полученных данных видно, что время удержания определяется именно нагревом из-за рэлеевского рассеяния, а не другими каналами потерь — потери из-за столкновений с остаточным газом при давлениях порядка  $10^{-11}$  Торр не могут быть столь существенны, в то время как потери из-за неупругих соударений не описывают экспоненциальную зависимость числа частиц от времени, наблюдавшуюся в эксперименте.

Время нагрева атома до высоты стенки из-за рэлеевского рассеяния определяется выражением

$$\tau = \frac{2mc^2 V_{\text{trap}}}{h\omega^2 \Gamma V_{\text{wall}}} (\omega - \omega_0), \quad (2)$$

где  $V_{\text{trap}}$  — объем ловушки, а  $V_{\text{wall}}$  — объем, занимаемый стенками.

Видно, что время нагрева зависит только от отстройки излучения от резонанса и отношения объема ловушки к объему, занимаемому стенками. Таким образом, время удержания атомов в ловушке может быть увеличено за счет более эффективной фокусировки пучков и уменьшения толщины стенок, а также за счет увеличения отстройки. Чтобы при увеличении отстройки не терялись атомы из-за понижения потенциала, можно реализовать дополнительное охлаждение атомов в оптической паточке на линии  $D_1$  [5].

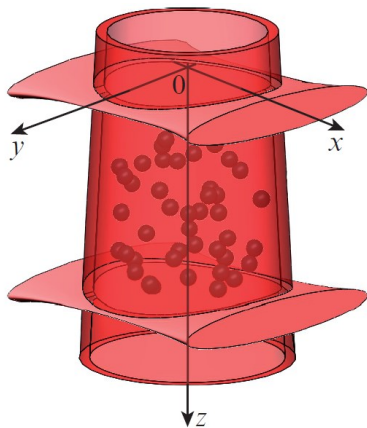


Рис. 1. Захваченные атомы (обозначены сферами) в оптической дипольной ловушке

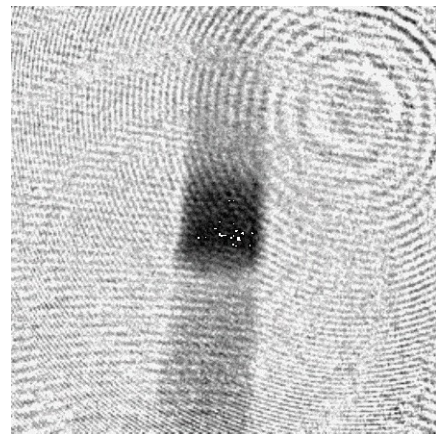


Рис. 2. Снимок атомов  ${}^6\text{Li}$  в ловушке в плоскости  $xz$ . Цвет соответствует доле поглощенного облаком атомов света (в процентах)

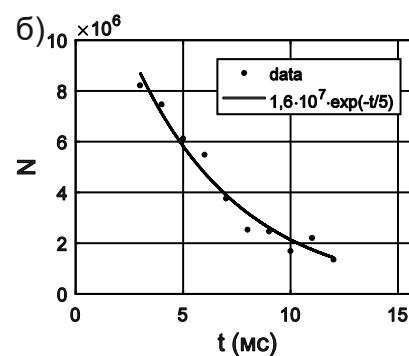
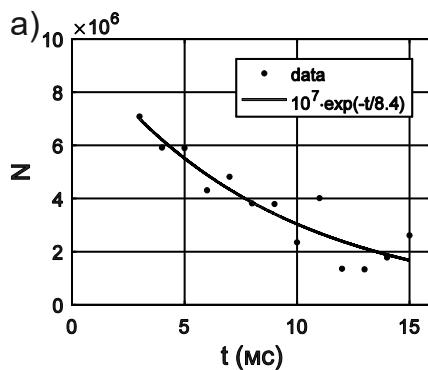


Рис. 3. Зависимость числа атомов в ловушке от времени для отстроек лучей дипольной ловушки: а — 4 ГГц; б — 2 ГГц

### Литература

1. Fulde P., Ferrell R. A. Superconductivity in a strong spin-exchange field // Phys. Rev. 1964. V. 135. P. A550–A563.
2. Larkin A. I., Ovchinnikov Yu. N. Nonuniform state of superconductors // Sov. Phys. JETP. 1965. V. 20. P. 762–770.
3. Kohn W., Luttinger J. M. New mechanism for superconductivity // Phys. Rev. Lett. 1965. V. 15. P. 524–526.
4. Grimm R., Weidemüller M., Ovchinnikov Y. B. Optical dipole traps for neutral atoms // Adv. At. Mol. Opt. Phys. 1999. V. 42. P. 95–170.
5. Kuga T., Torii Y., Shiokawa N., Hirano T., Shimizu Y., Sasada H. // Phys. Rev. Lett., 1997. V. 78. P. 4713–4716.

## Генерация третьей гармоники ( $\lambda/3$ ) излучения волоконного лазера на длине волны излучения $\lambda \sim 1$ мкм

*А. Р. Шайхтдинова<sup>1</sup>, А. В. Коняшкин<sup>1</sup>, П. Пулю<sup>2</sup>, О. А. Рябушкин<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НТО «ИРЭ-Полюс»

Волоконные лазеры нашли широкое применение в различных технологических процессах, таких как резка, сварка, гравировка и др. Активные волокна легируются ионами редкоземельных металлов, такими как иттербий, эрбий, тулий. Эффективную генерацию излучения, используя такие волокна, можно осуществлять только в узких спектральных диапазонах ближнего ИК. Новые длины волны излучения получают за счет различных нелинейно-оптических преобразований. Ультрафиолетовое (УФ) излучение, благодаря достаточно большой энергии квантов, применяется в литографии, микрообработке керамики, пластика, стекла [1].

Главной проблемой получения УФ-излучения достаточно высокой мощности является деградация и оптическое разрушение нелинейно-оптических кристаллов. Кристаллы трибората лития  $\text{LiB}_3\text{O}_5$  (LBO) обладают высоким порогом лучевой стойкости к длительному воздействию лазерного излучения и позволяют с хорошей эффективностью получать третью гармонику от длины волны излучения иттербиевых лазеров. Кроме высоких значений коэффициентов нелинейно-оптической восприимчивости, к преимуществам кристалла LBO по сравнению со всеми остальными кристаллами-боратами можно также отнести то, что он имеет широкие углы фазовых синхронизмов и обладает широкой полосой прозрачности [2, 3].

Данная работа посвящена исследованию особенностей процесса генерации третьей гармоники излучения иттербиевого лазера в нелинейно-оптическом кристалле LBO.

Упрощенная блок-схема установки для получения излучения с длиной волны 343 нм показана на рис. 1. Для накачки использовался импульсный лазер на длине волны 1030 нм со средней мощностью выходного излучения до 71 Вт с частотой следования импульсов 2 МГц и длительностью импульса 13 пс. На первой стадии получения второй гармоники излучение накачки проходит через собирающую линзу и фокусируется в кристалл LBO ( $5 \times 3 \times 3$  мм<sup>3</sup>). Полученное излучение второй гармоники на длине волны 515 нм проходит через систему из рассеивающей и собирающей линз и попадает во второй кристалл LBO ( $5 \times 3 \times 3$  мм<sup>3</sup>) для преобразования в УФ-излучение с длиной волны 343 нм. Диаметр перетяжки на длине волны 515 нм — от 515 мкм при 25% до 710 мкм при 100% мощности.

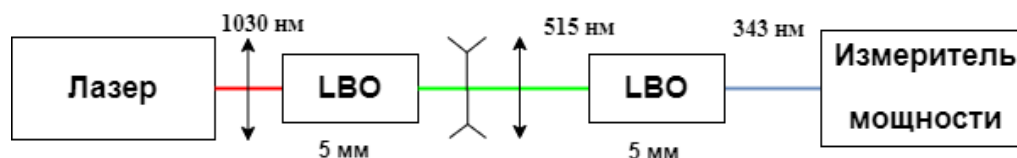


Рис. 1. Блок-схема оптической части экспериментальной установки

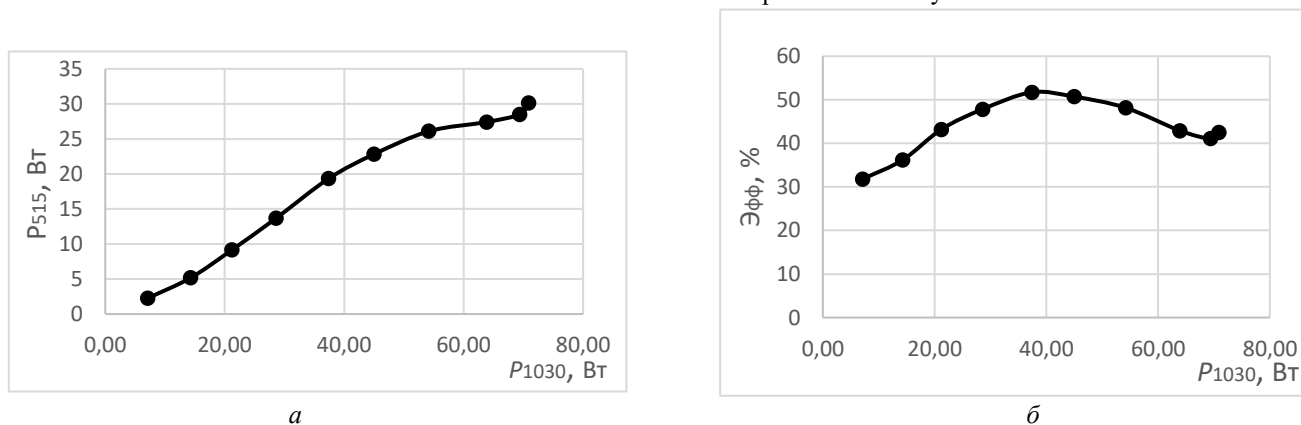


Рис. 2. Зависимость мощности излучения второй гармоники от мощности накачки (а); зависимость эффективности преобразования во вторую гармонику от мощности накачки (б)

На рис. 2, 3 показаны зависимости от мощности излучения накачки на длине волны 1030 нм мощностей выходного излучения на длинах волн 515 нм, 343 нм и эффективности преобразования ( $\text{Эфф}$ ). Эффективность преобразования рассчитывается в процентах как отношение мощностей излучения гармоник и мощности излучения на 1030 нм. Качество пучка выходного УФ-излучения  $M^2=1,2$ .

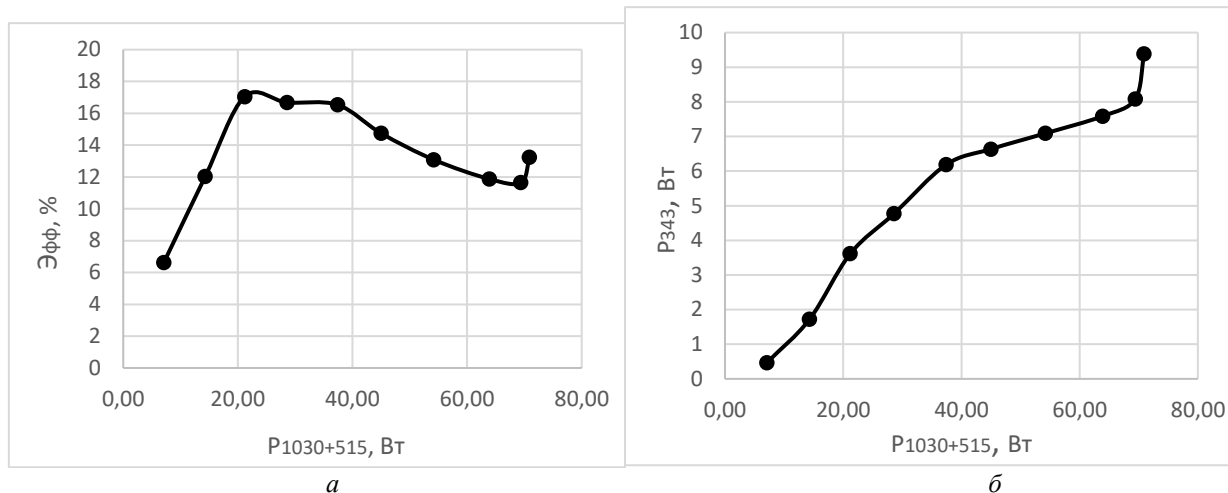


Рис. 3. Зависимость мощности излучения третьей гармоники от суммарной мощности накачки (а); зависимость эффективности преобразования в третью гармонику от суммарной мощности накачки (б)

### Литература

1. *Sharma E.* [et al.]. Evolution in lithography techniques: microlithography to nanolithography // *Nanomaterials*. 2022. V. 12(16): 2754.
2. *Chen C.* [et al.]. New nonlinear-optical crystal:  $\text{LiB}_3\text{O}_5$  // *JOSA B*. 1989. V. 6(4). P. 616–621.
3. *Lin S.* [et al.]. The nonlinear optical characteristics of a  $\text{LiB}_3\text{O}_5$  crystal // *J. Appl. Phys.* 1990. V. 67. P. 634–638.

УДК 539.1.01

## Поиск физики за пределами Стандартной модели с помощью $g$ -фактора связанного электрона

*Е. Д. Авдеенко*

СПбПУ Петра Великого

Стандартная модель физики элементарных частиц — одна из самых успешных научных теорий, но тем не менее на данный момент она не может являться полным описанием природы, так как не дает жизнеспособного кандидата на темную материю и не объясняет наблюдаемую барионную асимметрию Вселенной [1]. Поиск физики за пределами Стандартной модели — важнейшая научная задача, решение которой сможет приблизить современную физику к единой теории устройства Вселенной. Существует множество кандидатов на роль потенциального пятого взаимодействия и способ его детектирования [2]. Эксперименты по определению  $g$ -фактора свободного электрона уже использовались в качестве тестов для квантовой электродинамики (КЭД) и Стандартной модели. Благодаря росту точности в экспериментальном и теоретическом определении  $g$ -фактора связанных электронов подобные эксперименты имеют большое будущее в области поиска новой физики. Изучение влияния вклада новой физики в величину  $g$ -фактора электрона и сравнение этого вклада с существующими КЭД-поправками поможет найти эффективный способ тестирования физики за пределами Стандартной модели и определения ее констант.

В качестве модели потенциального пятого взаимодействия использовался потенциал портала Хиггса типа Юкавы [1, 2]. Массивные скалярные бозоны такого типа описывают взаимодействие между нуклонами и электронами, связываясь с обоими типами частиц спин-независимым образом. Были рассчитаны  $1s$  и  $2s$ -поправки новой физики к  $g$ -фактору гелия, кальция, олова и свинца. Далее изучалось влияние модели ядра на чувствительность тестирования новой физики. В данной работе возможный вклад новой физики определялся неопределенностью в экспериментальном определении величины изотопического сдвига  $g$ -фактора (разности  $g$ -факторов двух изотопов), которая определялась теоретической



неопределенностью, а та, в свою очередь, определялась неопределенностью из вклада поправки на конечный размер ядра, являющейся поправкой с наибольшей погрешностью. С помощью данных о неопределенностях в определении радиусов ядер [3] и методов [4, 5] были рассчитаны поправки в изотопический сдвиг на конечный размер ядра для двух моделей ядра: сферической и Ферми для тех же элементов. Затем рассчитаны вносимые ими погрешности. Далее те же расчеты были проделаны для метода специальных разностей — с целью устранить вносимые поправкой неопределенности и увеличить эффективность определения новой физики. Затем, исходя из этих данных, были построены зависимости константы новой физики от массы ее бозона для различных элементов. В результате удалось установить, что тестирование новой физики более эффективно для метода специальных разностей и меньших зарядовых чисел элементов.

Проведен расчет и анализ влияния модели ядра на погрешность определения вклада новой физики в величину  $g$ -фактора связанного электрона различных элементов, а также сравнительный анализ двух способов тестирования новой физики: метода изотопического сдвига и метода специальных разностей, построены графики зависимости величины вклада новой физики в  $g$ -фактор от массы бозона гипотетического пятого взаимодействия для обоих способов тестирования.

### Литература

1. *Debierre V., Keitel C. H., Harman Z.* Fifth-force search with the bound-electron  $g$  factor // *Phys. Lett. B.* 2020. V. 807. P. 135–147.
2. *Arcadi G., Djouadi A., Raidal M.* Dark Matter through the Higgs portal // *Phys. Rep.* 2019. V. 842. P. 1–180.
3. *Angeli I., Marinova K. P.* Correlations of nuclear charge radii with other nuclear observables // *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* 2015. V. 42(5): 055108.
4. *Kozhedub Y. S., Andreev O. V., Shabaev V. M.* Nuclear deformation effect on the binding energies in heavy ions // *Phys. Rev. A.* 2008. V. 77(3). P. 501–512.
5. *Glazov D. A., Shabaev V. M.* Finite nuclear size correction to the bound-electron  $g$  factor in a hydrogenlike atom // *Phys. Lett. A.* 2002. V. 297. P. 408–411.

УДК 622.73

### Исследование химического состава синтетических опаловых матриц методом лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии

**С. Ф. Уманская<sup>1</sup>, М. А. Шевченко<sup>1</sup>, А. В. Скрабатун<sup>1</sup>, А. А. Матрохин<sup>1,2</sup>, А. Н. Маресев<sup>1,2</sup>, О. А. Гусева<sup>1,2</sup>, Н. В. Чернега<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Синтетические опаловые матрицы (СОМ) — дешевые в производстве и простые в изготовлении трехмерные фотонные кристаллы. Такого рода упорядоченные среды могут быть использованы для решения задач биологии, фотоники и энергетики [1–3]. Такие структуры зачастую содержат примеси различных веществ, оказывающие влияние на электрические, оптические и акустические свойства. По этой причине важно уметь определять элементный состав СОМ. Одним из способов, который может решить эту задачу, является метод лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии (ЛИЭС). При фокусировке мощного лазерного излучения на поверхность опаловой матрицы образуется плазма. Далее ее спектр регистрируется и сопоставляется с известными атомными спектрами. Таким образом, по присутствующим спектральным линиям делается вывод о содержании примесей в СОМ. Ранее ЛИЭС применялся для анализа неупорядоченных субмикронных материалов [4].

В первую очередь в нашем эксперименте мы исследовали влияние запрещенной фотонной зоны (ФЗЗ) СОМ на спектр ЛИЭС. С этой целью были использованы два различных образца с размерами глобул 215 нм и 250 нм. ФЗЗ определялись по спектру отражения белого света от поверхности СОМ. Оказалось, что свет с длиной волны второй гармоники лазера Nd:YAG эффективно отражается на углах к нормали поверхности в  $0^\circ$  и  $40^\circ$  соответственно. Далее были получены спектры ЛИЭС при разных углах падения лазерного пучка с длиной волны 532 нм. Полученные данные показывают (рис. 1), что в случае, когда лазерное излучение попадает в ФЗЗ СОМ, происходит увеличение интенсивности спектральных линий. Вероятнее всего, это связано с усилением напряженности поля, возникающие на поверхности образцов благодаря брэгговскому отражению и последующей интерференции. Этот факт подтверждается

произведенным моделированием распределения электромагнитного поля методом конечных элементов для двумерной системы упорядоченно расположенных в пространстве диэлектрических глобул. Вместе с этим исследована зависимость интенсивность спектров ЛИЭС от длины волны возбуждения. Также с помощью данного метода зарегистрированы спектры различных металлов (рис. 2), которые предварительно были инфильтрованы в СОМ. Это иллюстрирует эффективность использования ЛИЭС для определения химического состава СОМ. Кроме того, было обнаружено увеличение интенсивности линий спектра ЛИЭС при нанесении серебряных наночастиц на поверхность СОМ. Исследованы условия, при которых влияние частиц оказывается наиболее эффективным.

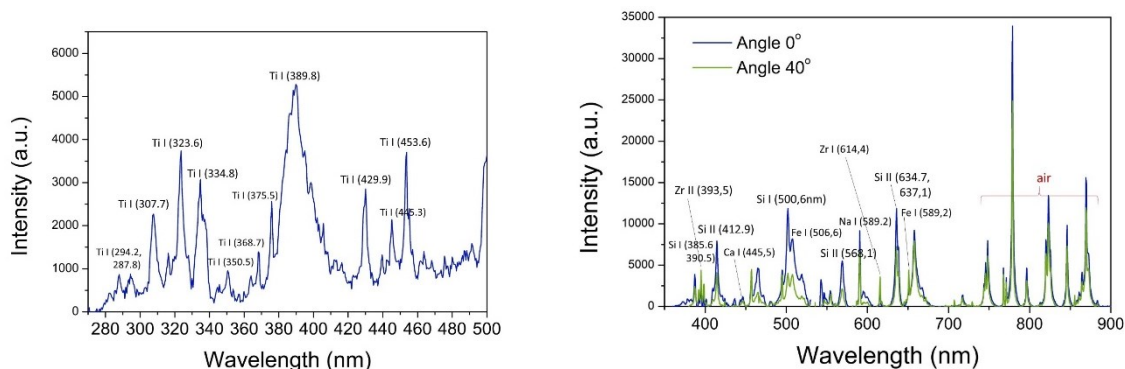


Рис. 1. Спектр ЛИЭС для СОМ с размером глобул 215 нм для разных углов падения лазерного пучка (532 нм)

Рис. 2. Спектр ЛИЭС для СОМ, заполненной  $\text{PbTiO}_3$ , при возбуждении излучением второй гармоники Nd–Yag лазера (532 нм,  $E = 10$  мДж)

## Литература

1. Zhu X. [et al.]. An inverse opal  $\text{Cu}_2\text{Nb}_3\text{O}_8$  anode for high-performance  $\text{Li}^+$  storage // Chem. Commun. 2020. V. 56(53). P. 7321–7324.
2. Kim D. [et al.]. 3D inverse-opal structured  $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  anode for fast Li-Ion storage capabilities // Electron. Mater. Lett. 2017. V. 13(6). P. 505–511.
3. Hong W. [et al.]. Full-color CO 2 gas sensing by an inverse opal photonic hydrogel // Chem. Commun. 2013. V. 49(74), P. 8229–8231.
4. Iqbal T. [et al.]. Qualitative and quantitative analysis of nanoparticles using laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) and energy dispersive x-ray spectroscopy (EDS) // Laser Phys. 2019. V. 29(11): 116001.

УДК 535.35

## Фотоотрыв электрона от дипольно-связанного молекулярного аниона

А. В. Мекшун<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Одно из актуальных направлений современной атомной, молекулярной и химической физики, а также смежных областей спектроскопии и физики плазмы тесно связано с изучением слабосвязанных атомно-молекулярных систем и эффектов их взаимодействия с нейтральными и заряженными частицами и электромагнитными полями. К ним, в частности, относятся дипольно-связанные анионы (ДСА), которые представляют собой отрицательные молекулярные ионы, в которых внешний электрон удерживается в слабосвязанном состоянии дипольным моментом сильнополярной нейтральной молекулы [1–3]. Характерные энергии связи ДСА составляют 1–20 мэВ, так что типичные размеры орбиты слабосвязанного электрона варьируются от нескольких десятков до сотни боровских радиусов. Большое количество экспериментальных и теоретических работ было посвящено изучению процессов и механизмов переноса заряда, происходящих с образованием ДСА в процессах столкновения ридберговских атомов с полярными молекулами [4–6]. Исследовались также процессы резонансной перезарядки при столкновениях двух полярных молекул, каждая из которых может образовать ДСА, резонансной перезарядки полярной молекулы на собственном катионе и ряд других эффективных реакций, сопровождающихся переносом

слабосвязанного электрона (см. [7] и приведенные там ссылки). Наряду с этим имеется серия работ, посвященных исследованиям процессов фотоотрыва электронов от ДСА и их изучение масс-спектрометрическими методами и методами фотоэлектронной спектроскопии [8].

В работе развивается полуаналитический подход для расчета сечения фотоотрыва электрона от слабосвязанного отрицательного иона. Ограничиваясь случаем дипольно-связанного аниона и пренебрегая эффектами вращения молекулярного остова аниона, для нахождения волновой функции электрона на расстояниях, много больших боровского радиуса, необходимо решать стационарное уравнение Шредингера с потенциалом вида (потенциал статического диполя):  $V_{\text{dip}}(r, \theta) = -d \cos \theta / r^2$ , где  $d$  — дипольный момент атома или молекулы,  $\theta$  — угол между направлением дипольного момента атома или молекулы и радиус-вектором электрона,  $r$  — расстояние между электроном и атомом или молекулой. При вычислении волновой функции дипольно-связанного электрона мы используем разложение по базису угловых функций. Подстановка этого разложения в гамильтониан, записанный в сферических координатах, приводит к системе связанных уравнений для адиабатических волновых функций электрона. При диагонализации потенциальной части гамильтониана в адиабатическом представлении (вычислении адиабатического гамильтониана) установлено, что из-за особенностей дипольно-связанного потенциала неадиабатические члены обнуляются. Этот эффект напрямую связан с тем фактом, что в сферических координатах центробежная часть потенциальной энергии зависит от расстояния обратно пропорционально его квадрату, так же как и потенциал диполя. Более аккуратное рассмотрение дополнительно требует включения обрезанного на малых расстояниях поляризационного члена  $V_{\text{pol}}(r) = -\alpha / 2r^4 f(r)$ . Здесь введено обозначение  $f(r) = 1 - \exp[-(r/r_0)^6]$ , где радиус  $r_0$  — эмпирический параметр порядка нескольких атомных единиц. Численным образом проведено решение уравнения Шредингера в потенциале  $V = V_{\text{dip}} + V_{\text{pol}}$ . Один из наиболее эффективных и общих подходов для решения этой задачи состоит в использовании метода  $R$ -матрицы.

В случае сложных молекул, следуя подходу, предложенному в работе [9], в рассмотрение были корректным образом включены эффекты вращения нейтрального молекулярного остова аниона. При этом в полном гамильтониане системы (полярная молекула + внешний электрон) помимо члена, описывающего движение внешнего электрона в потенциале  $V(r, \theta)$ , учитывался вращательный гамильтониан молекулы (используются атомные единицы  $e = m_e = \hbar = 1$ ):

$$H_{\text{rot}} = \frac{\hat{J}^2}{2I_A} + \frac{\hat{J}_\zeta^2}{2} \left( \frac{1}{I_C} - \frac{1}{I_A} \right),$$

рассматриваемый в модели симметричного волчка, для которого два из трех моментов инерции совпадают:  $I_A = I_B \neq I_C$ . Это имеет место для молекул, обладающих одной осью симметрии  $\zeta$  более чем второго порядка. Для такого типа молекул нами производилась диагонализация гамильтониана

$$H = H_{\text{rot}} + \frac{\hat{P}^2}{2r^2} + V(r, \theta)$$

при заданном значении полного углового момента  $J$  системы (электрон + молекула) при фиксированных значениях расстояния  $r$  с целью нахождения вращательно-адиабатических кривых потенциальной энергии  $\epsilon_{kJ}(r)$  в широкой области  $r$ . Полагалось, что в процессе фотоотрыва происходит возбуждение электрона на один из таких вращательно-адиабатических термов. После нахождения величин  $\epsilon_{kJ}(r)$  выполнялись расчеты движения электрона в таком вращательно-адиабатическом потенциале с энергиями столкновения выше порога. Для этого решалось одномерное уравнение Шредингера

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \epsilon_{kJ}(r) \right] \chi_{kJ}(r) = E \chi_{kJ}(r),$$

где  $E$  — энергия столкновения,  $J$  — вращательный момент, а  $k$  — его проекция на ось  $\zeta$  молекулы. Для получения эффективного фотоотрыва электрона волновая функция  $\chi_{kJ}(r)$  состояния непрерывного спектра должна иметь хорошее перекрытие с волновой функцией основного состояния аниона. Это выполняется для состояний с энергиями, соответствующими резонансам в рассеянии электронов. Есть два типа резонансов рассеяния, играющих важную роль в фотоотрыве: резонансы формы и резонансы Фешбаха. Резонансы формы обусловлены прохождением электрона внутрь центробежного барьера. Резонансы Фешбаха возникают при переходах от одной вращательно-адиабатической потенциальной кривой к другой. Таким образом, задача о фотоотрыве электрона от дипольно-связанного аниона сводится к нахождению энергий и ширин резонансов формы и резонансов Фешбаха для каждой потенциальной кривой  $\epsilon_{kJ}(r)$ .

Проведенный теоретический анализ показал, что использованный и развитый в работе метод расчета энергий и ширин резонансов разумно воспроизводит наблюдавшиеся в экспериментах основные особенности в спектрах фотоотрыва электронов от ряда дипольно-связанных анионов. В частности, этот метод количественно объясняет ярко выраженную регулярную вращательную структуру в положениях спектральных пиков.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 19-79-30086).

### Литература

1. *Simons J.* Molecular anions // *J. Phys. Chem. A.* 2008. V. 112. P. 6401–6511.
2. *Jordan K. D., Wang F.* Theory of dipole-bound anions // *An. Rev. Phys. Chem.* 2003. V. 54. P. 367-396
3. *Hao H.* [et al.]. Accurate predictions of electron binding energies of dipole-bound anions via quantum Monte Carlo methods // *J. Phys. Chem. Lett.* 2018. V. 9. P. 6185–6190.
4. *Desfrancois C.* [et al.]. Electron binding to valence and multipole states of molecules: Nitrobenzene, para- and meta-dinitrobenzenes // *J. Chem. Phys.* 1999. V. 111. P. 4569–4576.
5. *Lebedev V. S., Narits A. A.* Long-range interaction effects in a formation of dipole-bound anions induced by collisions of Rydberg atoms with polar molecules // *Chem. Phys. Lett.* 2013. V. 582. P. 10–14.
6. *Ciborowski S. M.* [et al.]. Dipole-bound anions: formed by Rydberg electron transfer (RET) and studied by velocity map imaging-anion photoelectron spectroscopy (VMI-aPES) // *Eur. Phys. J. D.* 2018. V. 72(8): 139.
7. *Chernov V. E., Danilyan A. V., Zon B. A.* Electron exchange between a dipole-bound anion and a polar molecule and dimer formation in dipole-bound anions // *Phys. Rev. A.* 2009. V. 80: 022702.
8. *Buytendyk A.M.* [et al.]. The hydrogen bond strength of the phenol–phenolate anionic complex: a computational and photoelectron spectroscopic study // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015. V. 17(37). P. 25109–25113.
9. *Clary D. C.* Photodetachment of Electrons from Dipolar Anions // *J. Phys. Chem.* 1988. V. 92. P. 3173–3181.

УДК 539.184.28

### Численный расчет сил электронных переходов в дипольном приближении в щелочных металлах при зеемановском расщеплении на примере лития-6

*Т. Д. Рузайкин<sup>1,2</sup>, К. А. Хоружий<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Российский квантовый центр (РКЦ)

Лазерное охлаждение стало активно развиваться в середине 1970-х гг., начиная с массового внедрения лазеров в эксперименты. Идея охлаждения состоит в резонансном поглощении атомом фотонов, приводящем к уменьшению его импульса. Однако поскольку атом меняет свою скорость в процессе замедления, в силу эффекта Доплера частота света в его системе отсчета также изменяется, вследствие чего он выходит из резонанса, интенсивность поглощения сильно падает и замедление останавливается. Но присутствует еще один аспект, состоящий в том, что энергетические уровни электрона в атоме вырождены, имеет место сверхтонкое и тонкое расщепления, и в результате происходит перекачка в «темные состояния», где излучение находится уже не в резонансе с нужными переходами в атоме, т. е. такие атомы выпадают из процесса замедления, так как перестают взаимодействовать со светом.

В 1982 г. был реализован [1] метод охлаждения с помощью зеемановского замедлителя. Вдоль оси движения с помощью набора катушек было создано меняющееся в пространстве магнитное поле, так что в силу эффекта Зеемана частоты электронных переходов подстраивались таким образом, чтобы замедление происходило постоянно при фиксированной частоте замедляющего луча, компенсируя эффект Доплера. К тому же снималось вырождение уровней, их энергия менялась достаточно для того, чтобы свести вклад перекачки к минимуму. Таким образом удалось добиться того, чтобы часть атомов (только часть, поскольку не все атомы попадают в циклический переход), имеющих скорость, меньшую некоторой граничной, имели уменьшенную скорость в конце замедлителя.

Замедление происходит только в циклическом переходе (аналог двухуровневой системы), причем строго при круговой поляризации света. Для максимизации количества замедленных атомов требуется, во-первых, до начала замедления добиться того, чтобы как можно больше атомов оказалось в нем, а во-вторых, сделать поляризацию замедляющего луча наиболее близкой к круговой. На практике ось магнитного поля выстроена неидеально, как и поляризация тормозящего излучения. Ось квантования берется обычно вдоль магнитного поля, и ее непараллельность направлению лазерного луча эквивалентна неидеальности поляризации падающего на атом излучения, поэтому достаточно рассмотреть влияние

присутствия лишних поляризационных компонент при взаимодействии света с атомами. Этому и посвящена данная работа. Для произвольного магнитного поля на примере  ${}^6\text{Li}$  численно были найдены силы переходов между электронными уровнями в тонкой структуре в дипольном приближении (расчет может проводиться аналогично для остальных щелочных металлов, имеющих 1 валентный электрон) для различных поляризаций: линейной  $\pi$  и круговых  $\sigma_+$  и  $\sigma_-$ .

Был взят гамильтониан

$$\hat{H}_{HFS} = A_J \mathbf{I} \cdot \mathbf{J} + g_J \mu_B \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}}, \quad (1)$$

найлены его собственные значения и вектора для произвольного внешнего магнитного поля  $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ . Здесь  $A_J$  — энергетическая константа сверхтонкого расщепления,  $\mathbf{I}$  и  $\mathbf{J}$  — операторы спинов ядра и электрона соответственно,  $g_J$  — фактор Ланде для электрона с учетом спин-орбитального взаимодействия. Для нижнего  $|Fm_F\rangle$  и верхнего  $|F'm'_F\rangle$  состояний сила перехода (см. формулу (5) из [2]) между ними

$$D \propto [\langle J'F'm'_F | \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{r} | Fm_F \rangle]^2, \quad (2)$$

где  $F$  задает сверхтонкое расщепление,  $\hat{\mathbf{e}}$  — вектор поляризации падающего излучения, а  $\mathbf{r}$  — координату электрона. Эту формулу можно переписать в развернутом виде, удобном для вычислений, с помощью формулы (17) из [2]. Далее учтем, что при наличии поля базисные состояния будут уже являться суперпозицией состояний  $|Fm_F\rangle$  для нижних уровней и  $|F'm'_F\rangle$  для верхних, т. е. необходимо искать величину

$$D \propto [\langle \alpha | \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{r} | \beta \rangle]^2, \quad (3)$$

где  $|\alpha\rangle$  и  $|\beta\rangle$  являются означенными выше суперпозициями. На примере  ${}^6\text{Li}$  (рис. 1) численно были посчитаны силы переходов между нижними и верхними уровнями в дипольном приближении. Результаты представлены на рис. 2.

Что примечательно, при наличии поля появляются переходы с изменением  $F$  на 2 (в обозначениях  $\{F, m_F\}$ ), причем проекции все так же меняются на  $q$  (0 или  $\pm 1$ ).

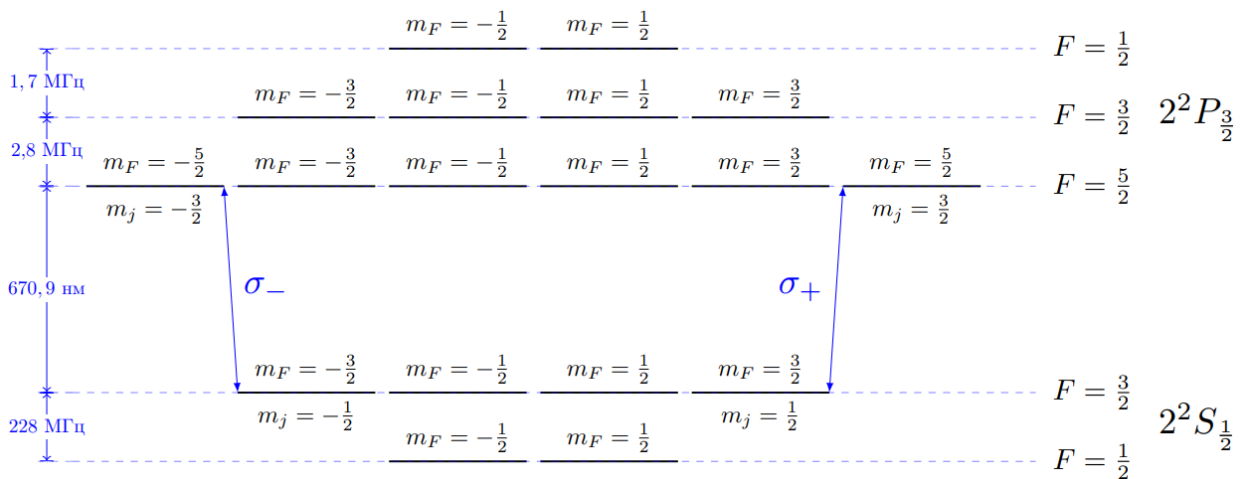


Рис. 1. Энергетическая структура уровней в атомах  ${}^6\text{Li}$  (рисунок взят из ВКР М. В. Платоновой «Торможение атомов лития-6 в разделенном зеемановском замедлителе»)

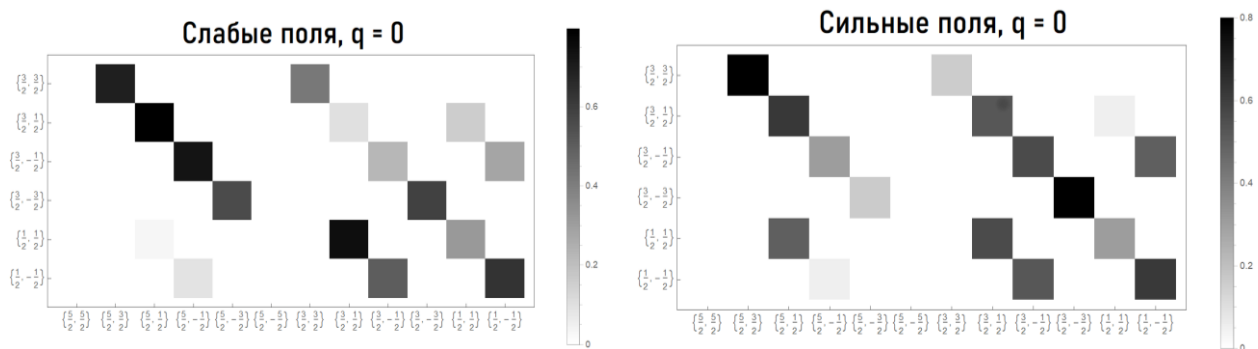


Рис. 2. Силы переходов в относительных единицах для линейной поляризации ( $q=0$ ) для D2-перехода в  ${}^6\text{Li}$  в пределе сильного и слабого магнитного поля. По вертикали обозначены нижние состояния, по горизонтали — верхние, в формате  $\{F, m_F\}$  — в том смысле, что при нулевом поле данное состояние было собственным

## Литература

1. *Philips W., Metcalf H.* Laser deceleration of an atomic beam // *Phys. Rev. L.* 1982. V. 48(9). P. 596–599.
2. *Farrell P. M., MacGillivray W. R.* On the consistency of Rabi frequency calculations // *J. Phys. A Math. Gen.* 1995. V. 28(1). P. 209–221.

УДК 535.015

### Изучение достоверности масштабируемой двухкубитной фазовой операции на ионах $^{171}\text{Yb}^+$ с помощью численного моделирования

*П. А. Каменских<sup>1,3</sup>, Н. В. Семенин<sup>2,3</sup>, И. А. Семериков<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>3</sup>Российский квантовый центр

К квантовым вычислениям проявляется высокий интерес: были разработаны алгоритмы, решающие сложные, эффективные задачи, такие как факторизация числа на простые множители и др. Однако для превосходства квантовых вычислений над классическими необходим универсальный квантовый компьютер, который удовлетворяет критериям ДиВинченцо.

Одной из платформ, на которых ведутся исследования, является ионная платформа, характеризующаяся большим временем когерентности кубитов и большими достоверностями квантовых операций (гейтов). Главная проблема для данной платформы — масштабируемость. Удержание длинной цепочки в ловушке Пауля сопряжено с рядом технических трудностей [1]. Вторая неизбежная проблема заключается в сложности адресации при увеличении числа ионов в ловушке.

В данной работе будет предложена масштабируемая двухкубитная операция на ионах иттербия  $^{171}\text{Yb}^+$ . За состояния кубита выбираются сверхтонкие уровни состояния  $^2S_{1/2}$ , так как они считаются устойчивыми к магнитному полю, а время когерентности данных состояний велико.

$$|0\rangle = |^2S_{1/2}, F=0\rangle, |1\rangle = |^2S_{1/2}, F=1\rangle, |2\rangle = |^2D_{3/2}, F=2\rangle, |e\rangle = |^3[3/2]_{1/2}, F=1\rangle. \quad (1)$$

Двухкубитная операция основана на дипольном переходе  $|2\rangle \rightarrow |e\rangle$ . Перед этим с помощью лазерного излучения на длине волны 435 нм производится переход  $|0\rangle \rightarrow |2\rangle$  для двух нужных нам кубитов. После этого на ионы с двух противоположных сторон вдоль оси ловушки подается лазерное излучение с длиной волны 935 нм, имеющее отстройку  $\Delta$  от состояния  $|e\rangle$  порядка 1–10 ГГц, что много больше ширины линии состояния  $|e\rangle$  ( $\Gamma_{3/2} = 2\pi \cdot 4,2$  МГц  $\ll \Delta$ ):  $\delta = \mu + \omega_s, \mu \ll \omega_s$ . Запишем также гамильтониан взаимодействия иона с лазерным излучением:

$$\hat{H}_j = \sum_{j=1,2} \Omega_j \cos(k_j \hat{z}_i - \omega_j t) \cdot |0_j\rangle \langle e_j| + \text{c.c.} \quad (2)$$

Полный гамильтониан включает в себя энергетические уровни ионов и взаимодействие с полем ловушки:

$$H_{\text{full}} = H_{\text{ph}} + H_{\text{IvI}} + H_2 + H_1. \quad (3)$$

Данный гамильтониан слишком сложен для вычислений, поэтому по аналогии с [2] можно получить приближенный гамильтониан:

$$\hat{H}_{\text{int}} \approx i\eta \cdot \Omega_{\text{eff}} \left( \hat{a} e^{i\mu t} + \hat{a}^\dagger e^{-i\mu t} \right) (|10\rangle \langle 10| - |01\rangle \langle 01|), \text{ где } \Omega_{\text{eff}} = \frac{\Omega^2}{4\Delta}, \quad \eta = 2k \sqrt{\frac{\hbar}{4m\omega_s}}. \quad (4)$$

Чтобы колебательные состояния ионов после проведения гейта не изменились, необходимо, чтобы  $\tau_g = 2\pi/\mu$ . При этом на состояния  $|10\rangle$  и  $|01\rangle$  накручивается фаза  $\chi = 2\pi(\Omega_{\text{eff}}\eta/\mu)^2$ .

Выберем такую отстройку  $\mu$ , чтобы фаза  $\chi = \pi/2$ . Тогда для гамильтониана (3) оператор эволюции за время  $\tau_g$  является  $U = \text{diag}(1, i, i, 1)$ . Фаза состояний не является физически измеряемой, поэтому перед началом операции производится гейт Адамара  $H$ , после — гейт  $R_Y(\pi/2)$ . Эволюция наблюдается на рис. 1. В этом случае за прошедшее время мы получим максимально запутанное состояние — «почти» состояние Белла  $|\psi\rangle = (|00\rangle + i|11\rangle)/\sqrt{2}$ .

Изучив идеальный случай, переходим к гамильтониану без приближений. Для этого производилось моделирование гамильтониана (3), где необходимо перейти в систему вращающейся волны (1-го лазера). Оператор координаты раскладывался около положений равновесия ионов:

$$k_j \hat{z}_i = k_j \langle z_i \rangle + \sum_{\alpha} \eta_{j,i}^{\alpha} (\hat{a}_{\alpha} + \hat{a}_{\alpha}^{\dagger}), \quad \text{где } \eta_{j,i}^{\alpha} = k_j B_i^{\alpha} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{s,\alpha}}}. \quad (5)$$

Также учитывались распады с уровня  $|e\rangle$  на уровень  $|1\rangle$ , эволюция считалась с помощью уравнения Линдблада. На рис. 1 показано отклонение от идеального случая.

Для оценки качества операции необходимо ввести определение достоверности  $F_{\rho_0}(\rho) = \langle \rho_0 | \hat{\rho} | \rho_0 \rangle$  в случае, когда  $\rho_0 = |\psi\rangle\langle\psi|$  — матрица плотности для состояния Белла.

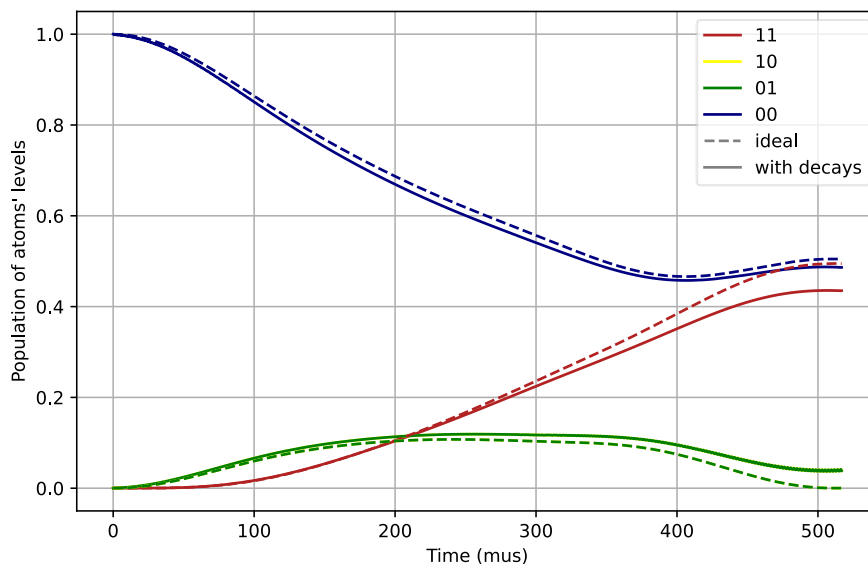


Рис. 1. Зависимость населенностей состояний кубитов от времени

Параметры системы:  $P = 0,1$  мВт,  $\Delta/2\pi = 1$  ГГц,  $\omega_s = 2\pi \cdot 0,45$  МГц,  $\Omega_1 \approx \Omega_2 = 2\pi \cdot 7,1$  МГц,  $\Gamma_{3/2} = 2\pi \cdot 4,2$  МГц.

В случае распадов достоверность оказалась равна  $\approx 0,89$ . Произведем также оценку достоверности операции. В большей степени достоверность зависит от населенности состояния  $|e\rangle$ :

$$1 - F(\rho) \approx \Gamma_{[3/2]} \tau_g \cdot P_e \approx \Gamma_{[3/2]} \tau_g \left( \frac{\Omega}{\Delta} \right)^2 \propto \Delta^{-1}. \quad (1)$$

Из (6) следует, что при фиксированном  $\tau_g$  ошибка  $(1 - F(\rho))$  уменьшается при увеличении отстройки от верхнего уровня и увеличении мощности лазера. Таким образом, можем получить масштабируемую двухкубитную операцию с высокой достоверностью.

### Литература

1. *Schiffner J. P.* Phase transitions in anisotropically confined ionic crystals // *Phys. Rev. Lett.* 1993. V. 70(6). P. 818–821.
2. *Baldwin C. H.* [et al.]. A high fidelity light-shift gate for clock-state qubits // *Phys. Rev. A.* 2021. V. 103: 012603.

# Секция современных проблем теоретической физики и физики конденсированного состояния

Председатель: Я. В. Фоминов (д. ф.-м. н., доцент)

Зам. председателя: Н. С. Шуравин

Секретарь: А. Е. Дорогов

Дата: 07.04.2023

Время: 10:00

УДК 538.945

## Глубокое квантовое обучение в цепочках сверхпроводниковых кубитов-трансмонов

*А. Е. Толстобров<sup>1,4</sup>, Г. П. Федоров<sup>1,2,4</sup>, Ш. В. Сандуляну<sup>1,2,4</sup>, Д. А. Калачева<sup>3,1,2</sup>, А. Н. Болгар<sup>3,1</sup>, В. Б. Лубсанов<sup>1</sup>,  
Ш. В. Кадырметов<sup>1</sup>, А. Е. Дорогов<sup>1,4</sup>, А. Васенин<sup>3,1</sup>, А. Ю. Дмитриев<sup>3,1</sup>, О. В. Астафьев<sup>3,1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИТУ МИСИС

<sup>3</sup>Сколковский институт науки и технологий

<sup>4</sup>Российский квантовый центр

Возможность использования сверхпроводниковых кубитов для решения задач машинного обучения представляет большой интерес для научного сообщества в последние годы [1, 2]. Экспериментальное решение задачи бинарной классификации на таких системах уже было реализовано [3]. В данной работе мы успешно решили 3 задачи классификации для различных наборов данных — задача четности, определение рака молочной железы (бинарная классификация) и классификация вин (многоклассовая классификация). Принципиальная схема работы алгоритма изображена на рис. 1.

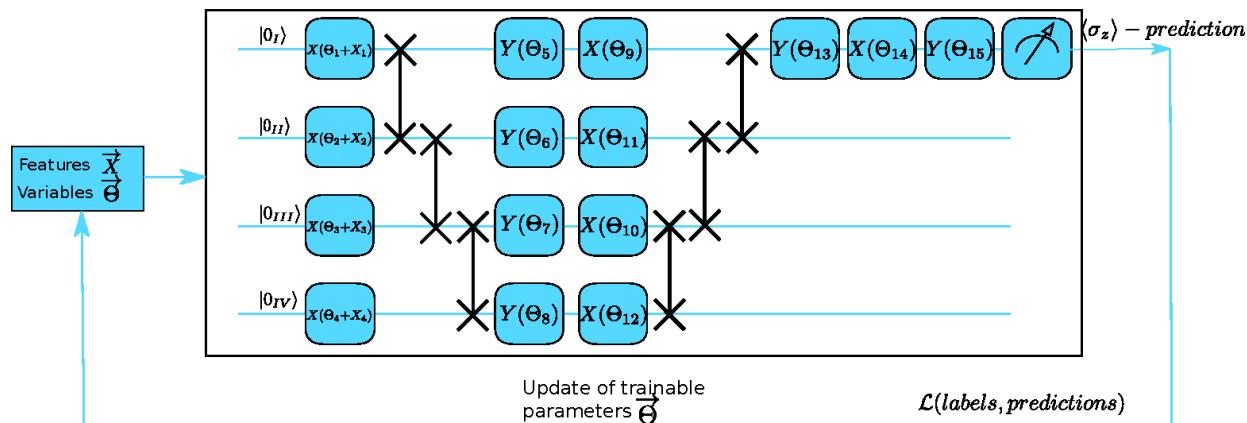


Рис. 1. Схема работы алгоритма. Запись данных ( $X_1$ – $X_4$ ) производится в параметры первого слоя однокубитных операций. Дальнейшие слои состоят из чередующихся слоев двухкубитных операций  $i$ -Swap и слоев однокубитных операций, с оптимизируемыми параметрами

Подобрав параметры цепочки  $\theta_1$ – $\theta_{15}$  с помощью градиентного спуска, удается добиться хорошего разделения двух классов в задачах бинарной классификации. В этом случае к одному классу относят те объекты, для которых  $\langle \sigma_z \rangle > 0$ , а ко второму те, для которых  $\langle \sigma_z \rangle < 0$ . Работоспособность алгоритма была протестирована на трех различных задачах. В задаче четности требуется определить четность бинарной последовательности длины 4. Данная задача является тестом работоспособности нашей системы и воспроизводимости операций — она имеет точное решение, а размер обучающей выборки составляет  $2^4 = 16$ . Все это позволяет достичь точности классификации 100% на данной задаче. Следующая задача — диагностирование рака молочной железы — является более сложной, так как размер обучающей выборки



составляет уже несколько сотен, а также данные не имеют явных закономерностей. С помощью квантовой цепочки на данной задаче удается добиться точности классификации 95%. Последняя из рассмотренных задач — задача классификации вин — является наиболее интересной в данном контексте, так как требует классификации на 3 сорта. Для классификации на 3 класса использовалась модификация описанного алгоритма, которая включала в себя 3 запуска алгоритма для решения задачи «один против всех», после чего выбирался класс, вероятность которого является наивысшей. Данным способом удалось добиться точности 94%, что сопоставимо с точностью, получаемой классическими методами машинного обучения. Полученные результаты систематизированы на рис. 2.

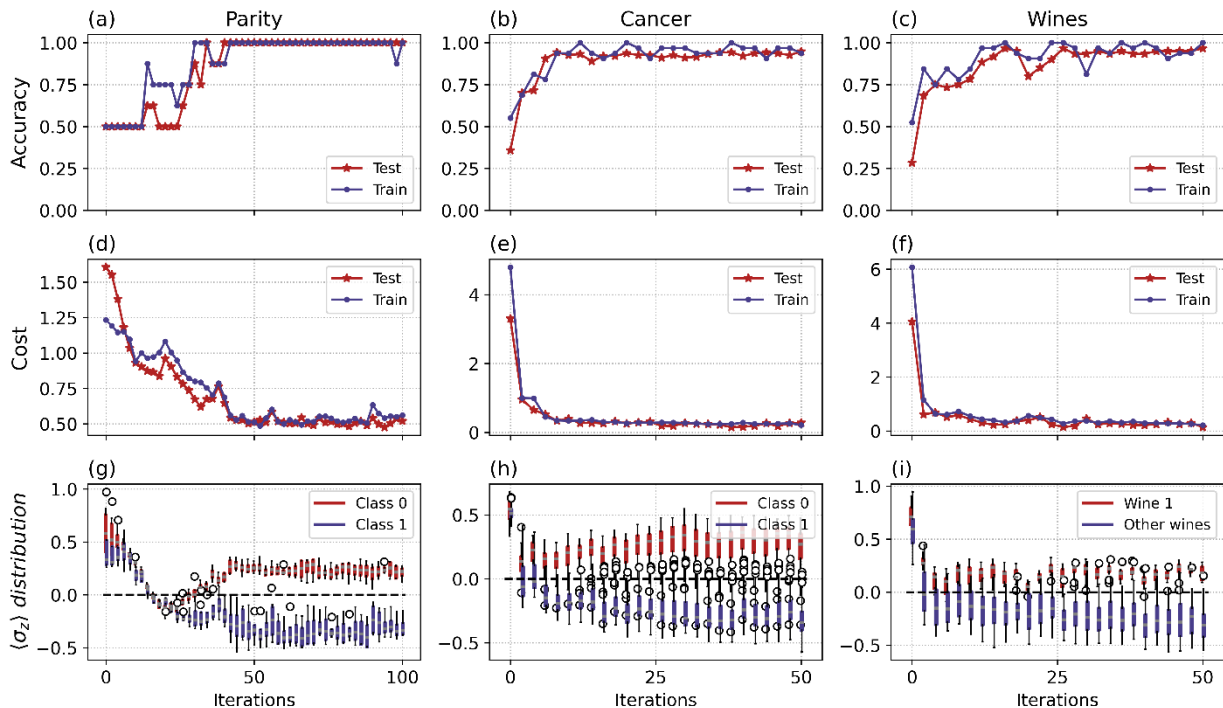


Рис. 2. Визуализация процесса обучения. По строкам построены точность, значение функции потерь и разделение двух классов в зависимости от числа итераций. Разным столбцам соответствуют задача четности, диагностирование рака молочной железы и классификация вин

## Литература

1. *Schuld M., Killoran N.* Quantum machine learning in feature hilbert spaces // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122: 040504.
2. *Mitarai K. [et al.].* Quantum circuit learning // Phys. Rev. A. 2018. V. 98: 032309.
3. *Ren W. [et al.].* Experimental quantum adversarial learning with programmable superconducting qubits // Nat. Comput. Sci. V. 2(11). 2022. P. 711–717.

УДК 538.945

## Влияние сверхпроводимости на неоднородный магнетизм в грязных SF-контактах

*А. В. Левин<sup>1</sup>, П. М. Островский<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart

Мы изучаем контакт сверхпроводника и неоднородного ферромагнетика (SF-контакт), напыленного на поверхность сверхпроводника тонким слоем. В отсутствие сверхпроводника наиболее энергетически выгодное состояние ферромагнетика соответствует пространственно однородной намагниченности. В то же время куперовские пары из сверхпроводника более эффективно проникают в ферромагнетик, если его намагниченность достаточно быстро меняется в пространстве [1, 2]. Вследствие конкуренции этих двух эффектов может происходить фазовый переход второго рода между однородно намагниченным и геликоидальным состоянием ферромагнетика.

Мы используем приближения большого количества примесей ( $\Delta\tau \ll 1$ ) и достаточно тонкого ферромагнитного слоя ( $d \ll \sqrt{D/\{\Delta, \hbar\}}$ ). Также предполагается, что граница между сверхпроводником и ферромагнетиком имеет туннельный характер. Эти предположения позволяют описывать гибридную систему при помощи двумерного уравнения Узалея.

Мы решили в общем виде задачу на минимум сверхпроводящей энергии при наличии неоднородной намагниченности и построили функционал Ландау, разложив свободную энергию системы по степеням градиента намагниченности. Это позволило нам определить условия, при которых происходит фазовый переход между однородным и геликоидальным состоянием ферромагнетика. В частности, мы продемонстрировали довольно неожиданное явление «резонанса»: когда обменная энергия ферромагнетика равна наведенному эффектом близости сверхпроводящему параметру порядка, переход в геликоидальное состояние может произойти при сколь угодно большой магнитной жесткости ферромагнетика.

Помимо описания фазового перехода развитый нами метод позволяет также изучить более общий случай произвольных параметров системы и предсказать величину волнового вектора геликоидального состояния вдали от перехода. Мы планируем решить эту задачу в ближайшем будущем.

### Литература

1. *Bergeret F. S., Efetov K. B., Larkin A. I.* Nonhomogeneous magnetic order in superconductor-ferromagnet multilayers // *Phys. Rev. B.* 2000. V. 62: 11872.
2. *Bergeret F. S., Volkov A. F., Efetov K. B.* Odd triplet superconductivity and related phenomena in superconductor-ferromagnet structures // *Rev. Mod. Phys.* 2005. V. 77(4): 1321.

УДК 538.955

## Влияние магнонов на сверхпроводящее состояние в гетероструктурах сверхпроводник–магнетик

*А. С. Яновская<sup>2,1</sup>, А. М. Бобков<sup>1</sup>, И. В. Бобкова<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Хорошо известно, что в тонкопленочных гибридных структурах сверхпроводник/ферромагнитный изолятор в результате эффекта близости с ферромагнетиком подавляется сверхпроводимость [1], а также в сверхпроводнике наводится зеемановское расщепление плотности состояний [2]. В данной работе исследуется влияние магнонов в ферромагнетике на этот эффект.

Для нахождения плотности состояний мы вывели уравнение Горькова с учетом магнонной собственно-энергетической части:

$$(\varepsilon - \xi_k \tau_z - \sigma \tilde{U} - \Delta \tau_x - \hat{\Sigma}_m) \hat{G}_{\sigma,k}(\omega) = 1, \quad (1)$$

$$\hat{\Sigma}_m = -V^2 T \sum_{q,\Omega} B_q(\Omega) \hat{G}_{0,\bar{\sigma},k-\sigma q}(\omega - \sigma\Omega), \quad \tilde{U} = -\frac{J}{2|\gamma|} (M_s - N_m |\gamma|),$$

$$B_q(\Omega) = \frac{1}{i\Omega - (\omega_0 + Dq^2)}.$$

Здесь  $\varepsilon$  — энергия электронов,  $\xi_k$  — кинетическая энергия электронов в нормальном металле,  $\tilde{U}$  — перенормированное с учетом магнонов зеемановское наведенное эффективное поле,  $\hat{\Sigma}_m$  — собственная энергетическая магнонная часть,  $\hat{G}_0$  — гриновская функция без учета магнонов,  $J$  — обменный интеграл,  $N_m$  — число магнонов,  $\Omega$  — мацубаровская частота магнонов,  $\omega_0$  — щель в магнонном спектре.

В полученную собственно-энергетическую часть входят все магнонные поправки к параметрам в уравнении (1). Затем из уравнения Горькова была найдена функция Грина, в которую включаются перенормированные с учетом магнонов параметры системы. Далее из функции Грина была найдена плотность состояний электронов и спектр квазичастиц в сверхпроводнике (рис. 1).

В спектре квазичастиц с учетом магнонов наблюдаются отличия от спектра квазичастиц без учета магнонов, а именно, сдвиг ветвей спектра и особенности («кинки») на ветви со спином вниз. В плотности состояний также есть важные отличия от случая без учета магнонов: уменьшение зеемановского расщеп-

ления, изменение высоты пиков, а также уширение внешнего пика. Что интересно, такая плотность состояний дает большее согласие с экспериментом [2], чем плотность состояний в случае без магнонов.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФ № 22-42-04408.

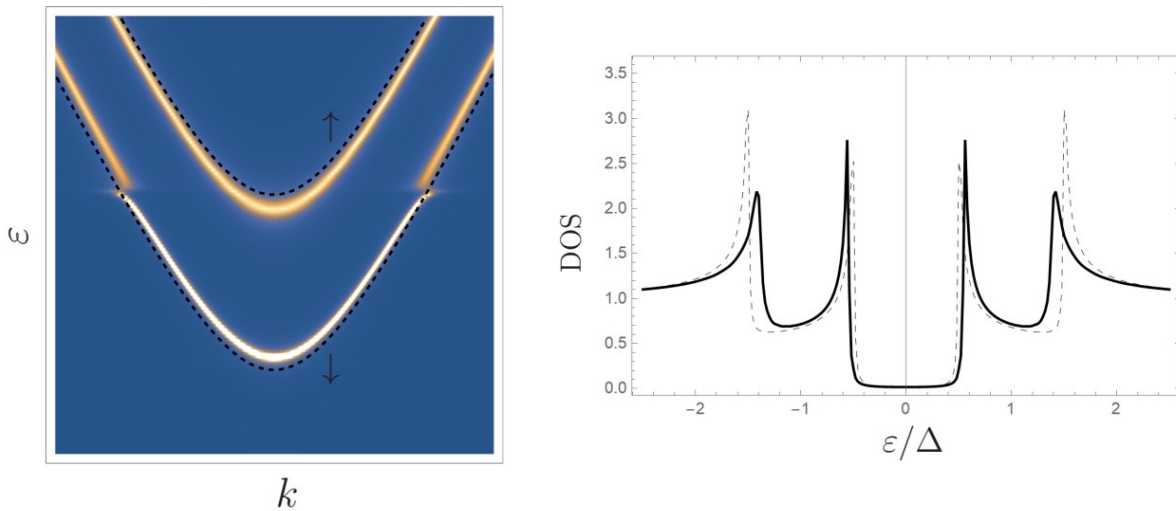


Рис. 1. Спектр квазичастиц (слева) и плотность состояний электронов (справа) без учета магнонов (штриховая линия) и с учетом магнонов (жирная линия)

### Литература

1. *Sarma G.* On the influence of a uniform exchange field acting on the spins of the conduction electrons in a superconductor // *J. Phys. Chem. Solids.* 1963. V. 24(8). P. 1029–1032.
2. *Strambini E., Golovach V.N., De Simoni G., Moodera J.S., Bergeret F.S., Giazotto F.* Revealing the magnetic proximity effect in EuS/Al bilayers through superconducting tunneling spectroscopy // *Phys. Rev. Mater.* 2017. V. 1(5): 054402.

УДК 538.945

## Моделирование СВЧ-генератора на основе джозефсоновского перехода

*Р. Тюменев, Д. С. Калашиников, В. С. Столяров*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Физические системы, используемые для квантовых вычислений, работающие в микроволновом диапазоне, требуют передовой управляющей электроники, а использование интегрированных компонентов, работающих при температуре квантовых устройств, потенциально выгодно.

В данной работе исследовались характеристики одиночного джозефсоновского контакта, используемого в качестве генератора переменного тока. В ходе работы было проведено сравнение между резистивной моделью и резистивной моделью с емкостью, подразумевающие собой SNS- и SIS-структуры соответственно. В качестве критерия появления генерации переменного тока использовалось условие, описанное в работах [1, 2]. Для расчета импеданса использовался метод, предложенный в [3], в нормированных величинах:

$$Z_w = R_w + jX_w = \left(\frac{1}{T i_w}\right) \int_0^{T \rightarrow \infty} \phi e^{j\omega t} dt. \quad (1)$$

В результате работы была показана возможность генерации сигнала для SIS-структуры, также была проанализирована возможность генерации в зависимости от изменяемых параметров для реальной физической системы ( $\beta, I_{dc}, W$ ) (рис. 1). Было выявлено, что генерация гармонического сигнала на определенной частоте связана с нахождением системы на первой ступени Шапиро. Также была получена улучшенная аналитическая модель, используемая в [1], для зависимости импеданса от переменного тока в системе. Зависимость импеданса в полученной аналитической модели совпадает с данными, полученными моделированием резистивной модели с емкостью (рис. 2).

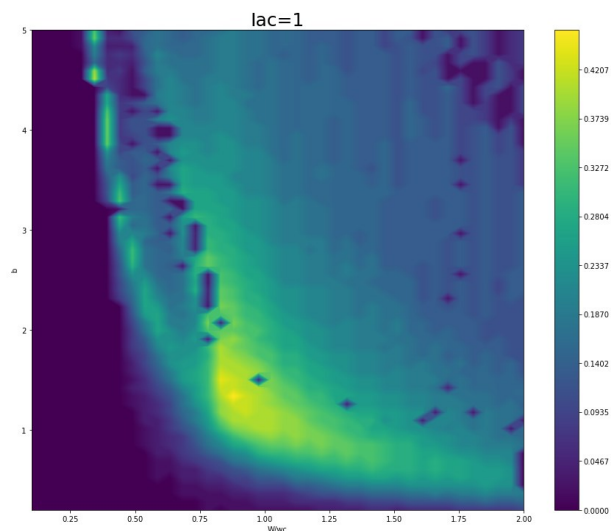


Рис. 1. Цветом обозначен диапазон возможного изменения  $I_{dc}$  (ноль соответствует отсутствию генерации) для параметров  $\beta, W$ , при котором возникает переменный ток величиной  $I_{ac} = I_c$

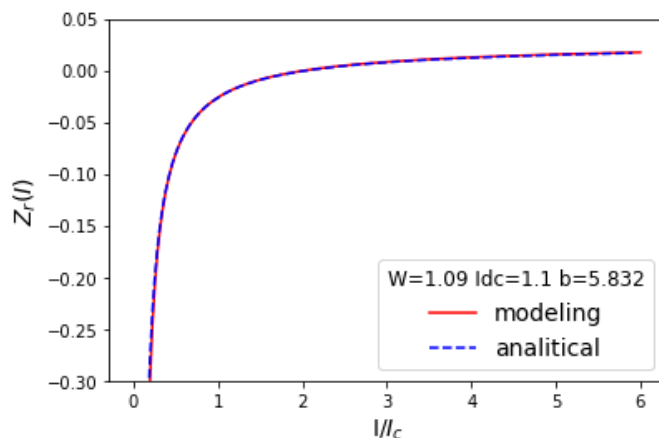


Рис. 2. Зависимость импеданса от переменного тока в нормированных величинах для моделирования полученной аналитической модели

### Литература

1. *Chengyu Y.* [et al.]. A low-noise on-chip coherent microwave source // Nat. Electron. 2021. P. 885–892.
2. *Hassel J., Grönberg L., Helistö P., Seppä H.* Self-synchronization in distributed Josephson junction arrays studied using harmonic analysis and power balance // Appl. Phys. Lett. 2006. V. 89: 072503.
3. *Zhai Z., Parimi P. V., Sridhar S.* Nonlinear microwave impedance of short and long Josephson junctions // Phys. Rev. B. 1999. V. 59(14). P. 9573–9580.

УДК 538.91

### Квантовые вычисления на границе шестиугольной модели Китаева с беспорядком

*И. Л. Тимошук<sup>1</sup>, К. С. Тихонов<sup>2</sup>, Ю. Г. Махлин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Международная лаборатория физики конденсированного состояния, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

<sup>2</sup>Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН

Использование краевых мод для проведения квантовых вычислений может стать одним из способов реализации квантовых компьютеров, топологически защищенных от внешних шумов. Способность киральных краевых состояний самостоятельно перемещаться вдоль границы позволяет упростить проведение операции переплетения, что облегчает выполнение различных квантовых операций.

В рамках данной работы [1] описана возможность проведения квантовых вычислений с использованием краевых состояний в двумерной шестиугольной модели Китаева [2] и влияние различных видов шума на точность проведения операций. В работе показано, как при помощи включения локальных взаимодействий между внешним кубитом и спинами образца с краем типа zigzag можно провести операцию обмена состояний двух внешних кубитов (рис. 1).

Далее были описаны два способа взаимодействия внешнего спина с краем и подробно рассмотрена точность проведения операции обмена для одного из них, позволяющего записывать состояние внешнего кубита на край в виде волнового пакета произвольной формы.

В заключительной части работы было найдено влияние беспорядка и различных шумов на точность квантовой операции. Для проверки аналитических вычислений использовалась численная симуляция фермионного гамильтониана модели Китаева с беспорядком (рис. 2).

Работа выполнена при поддержке грантом РФФИ № 20-52-12034 и программой фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

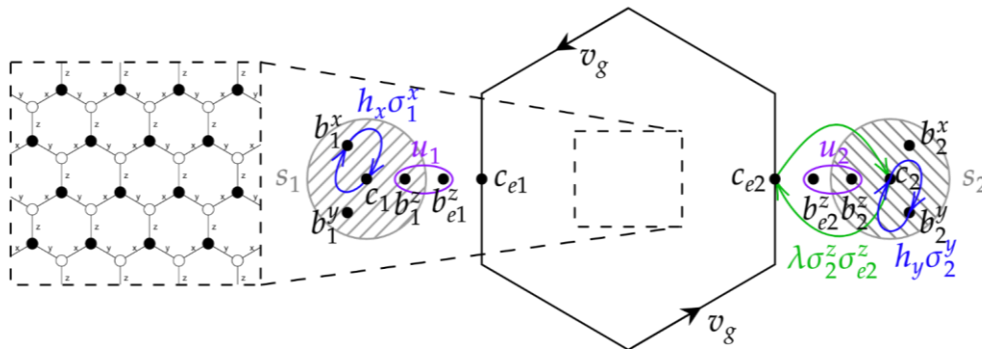


Рис. 1. Схема проведения операции обмена с помощью края. Два внешних спина  $S_1$  и  $S_2$  взаимодействуют с краем образца модели Китаева. Квантовые состояния кубитов  $S_1$  и  $S_2$  можно обменять, производя последовательно локальные обмены майорановских фермионов.  $zz$ -взаимодействие внешнего кубита с одним из спинов края, включенное на заданное время, приводит к обмену  $c$ -фермионов данных кубитов. Приложение локального магнитного поля к одному из внешних кубитов приводит к обмену  $b$ - и  $c$ -фермионов данного кубита

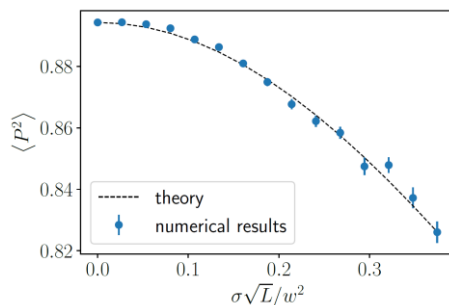


Рис. 2. Зависимость точности проведения квантовой операции от силы беспорядка системы. Сравнение полученной аналитической формулы с результатами численной симуляции

### Литература

1. Timoshuk I. L., Tikhonov K. S., Makhlin Y. G. Quantum computation at the edge of a disordered Kitaev honeycomb lattice// arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2302.10123.
2. Kitaev A. Anyons in an exactly solved model and beyond// Ann. Phys. 2006. V. 321(1). P. 2–111.

---

# Секция суперкомпьютерного моделирования кинетических процессов

---

Председатель: Ю. Ю. Клосс (д. ф.-м. н., доцент)

Зам. председателя: В. А. Юсим (к. т. н.)

Секретарь: И. В. Говорун

---

Дата: 04.04.2023

Время: 10:30

УДК 54.061

## Математическое моделирование процессов теплопереноса при выращивании монокристаллов дифторидов со структурой флюорита в закрытых тиглях методом ГНК

*Ф. А. Юсим<sup>2</sup>, С. Э. Саркисов<sup>2</sup>, В. А. Юсим<sup>1,2</sup>, П. А. Татауров<sup>2</sup>, Л. В. Иванова<sup>3</sup>, В. П. Михайлов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>Московский государственный институт международных отношений (университет) МИД

Проведено математическое моделирование процессов теплопереноса при выращивании монокристаллов дифторидов MF<sub>2</sub> (M = Ca, Sr, Ba, Cd) со структурой флюорита (пространственная группа Fm $\bar{3}$ m) в закрытых тиглях методом горизонтально направленной кристаллизации.

Применение технологии синтеза монокристаллов дифторидов с использованием вакуумной атмосферы (до 10<sup>-5</sup> Па) является наиболее предпочтительным способом выращивания согласно большинству источников литературы [1, 2]. Так, например, при использовании вакуумной технологии возможно удаление нежелательных легколетучих веществ из монокристалла на всем протяжении процесса, тогда как при выращивании монокристаллов при избыточном давлении — только во время предварительного плавления процесса обезгаживания [1]. При выращивании монокристаллов дифторидов вакуумная технология нашла широкое применение, в частности в методах Бриджмена–Стокбаргера и Чохральского.

Согласно работе [3] метод ГНК, используемый авторами, имеет незначительные характерные недостатки, так, при выращивании монокристаллов химически непрочных веществ с использованием вакуумной технологии можно столкнуться с активным испарением кристаллического вещества из-за большой открытой площади поверхности расплава [1]. Вследствие этого выращивать кристаллы химически непрочных веществ, используя данный метод, необходимо при избыточном давлении инертных газов.

Авторами была разработана технология выращивания монокристаллов дифторидов методом ГНК в закрытых (запечатанных) тиглях, изображенных на рис. 1а–в, с использованием вакуумной технологии.

В качестве иллюстрации данного решения предлагается методика численного моделирования и исследования процессов тепло- и массопереноса. Таким образом, рассматривался квазистационарный тепловой процесс синтеза монокристаллов дифторидов MF<sub>2</sub> (M = Ca, Sr, Ba, Cd), имеющих различную теплопроводность [4] методом ГНК в углеграфитовом тепловом узле (УГТУ) с использованием вакуумной технологии выращивания монокристаллов. Перенос тепла в монокристалле осуществлялся путем механизмов молекулярной теплопроводности и радиационно-кондуктивного теплообмена. Сами монокристаллы находились в состоянии конвективного теплообмена со средой в углеграфитовом узле и лучистого теплообмена с окружающими его поверхностями.

В расчетную математическую модель исследуемых монокристаллов входили: уравнение энергии, уравнения переноса тепла и излучения, граничные условия теплопроводности и излучения на границах кристалла [5]. Также исследуемая модель являлась частью полной модели тепло- и массопереноса для обобщенного цикла.

В данной работе выполнены исследования процессов теплопереноса при выращивании монокристаллов дифторидов методом ГНК в УГТУ с использованием закрытых (запечатанных) тиглях при различных атмосферах выращивания. Для конструкции УГТУ с закрытым тиглем, помещенного в кристал-

лизационную установку (КИ), предложена математическая модель процессов переноса тепла: кондуктивным, радиационным в приближении «серого» тела и конвективным механизмами. Эта математическая модель описывает процессы теплопереноса в геометрически сложных, неоднородных и неоднородных по своим теплофизическим свойствам областях. Для численного решения такой задачи использован конечно-элементный метод, в течение длительного времени развиваемый авторами [3].

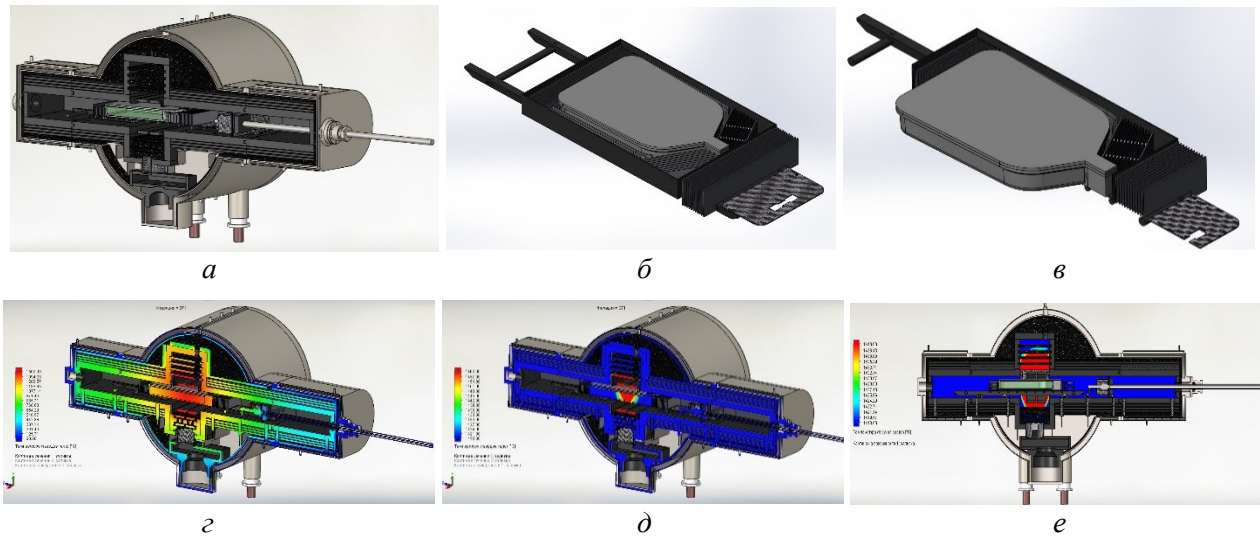


Рис. 1. Полноразмерная модель углеграфитового ростового узла (а) с закрытым тиглем (б, в), помещенного в кристаллизационный аппарат; результат компьютерного моделирования распределения температуры по осевому продольному сечению (г–е) (представлено для монокристалла  $\text{CdF}_2$ )

В результате выполненных расчетов исследования процессов тепло- и массопереноса в УГТУ с использованием закрытых тиглей были также получены необходимые данные о влиянии температурных полей на форму фронта кристаллизации в различных атмосферах выращивания монокристаллов. Установлено, что конструкция УГТУ с использованием данных тиглей создает тепловые условия, обеспечивает слегка выпуклую изотерму фронта роста, что позволяет выращивать оптически совершенные кристаллы. Выявлено, что наиболее благоприятные условия при выращивании наблюдаются в атмосфере вакуума.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 20-08-00278 А) и НИЦ «Курчатовский институт» (приказ НИЦ «Курчатовский институт» от 18.08.2022 г. № 2174).

### Литература

1. Багдасаров Х. С. Высокотемпературная кристаллизация из расплава. — М.: Физматлит, 2004.
2. Ушаков С. Н., Усламина М. А., Ниццев К. Н. Лазерные кристаллы фторидов, активированные редкоземельными ионами, и методика их выращивания на установке «НИКА-3» // Российский научный мир. 2014. № 2(4). С. 131–140.
3. Юсим В. А. Разработка новых принципов выращивания и управления радиационным дефектообразованием в структурах кристаллов фторидов: дис. ... канд. техн. наук: 01.04.07: защищена 11.05.22; утв. 27.09.22. — Долгопрудный, 2022.
4. Попов П. А., Федоров П. П., Осико В. В. Теплопроводность монокристаллов со структурой флюорита: фторид кадмия // Физика твердого тела. 2010. Т. 52. Вып. 3. С. 469–473.
5. Багдасаров Х. С. Горяинов Л. А. Тепло- и массоперенос при выращивании монокристаллов направленной кристаллизацией. — М.: Физматлит, 2007.

## Модель диффузии на делокализованном поляроне для оценки вклада различных молекулярных фрагментов в подвижность

*В. В. Беляев<sup>1,2</sup>, А. С. Соломатин<sup>3</sup>, Д. Н. Чаусов<sup>4</sup>, Р. Н. Кучеров<sup>4</sup>, А. А. Беляев<sup>1</sup>, Е. В. Царева<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Государственный университет просвещения (ГУП),

<sup>2</sup>Российский университет дружбы народов

<sup>3</sup>Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева

<sup>4</sup>Московский инженерно-физический институт

Используя модель диффузии на делокализованном поляроне, оценена скорость переноса заряда между двумя органическими молекулами или их частями и подвижность носителей заряда  $\mu$  с учетом электронной связи между зарядами, локального и нелокального электрон-фононного взаимодействия. Для моделирования ориентации молекул и оценки энергии взаимодействия молекул или их фрагментов использован метод межзатомных потенциалов.

Разработка элементной базы современных интеллектуальных систем для обеспечения решения сложных задач искусственных нейронных сетей, бионических, когнитивных систем, интерфейса мозг–машина, систем с большим количеством элементов и малым временем обработки и генерации сигналов является важной задачей. Среди электронных устройств и материалов органические системы становятся все более популярными из-за малого веса, низкого энергопотребления, лучшей функциональности. Актуальной задачей является поиск и разработка материалов для органической электроники с высокой  $\mu$ . Чтобы повысить эффективность этого процесса, полезно разработать метод оценки взаимосвязи между подвижностью и структурой органических молекул. Их структура очень сложная с полициклическими, ароматическими и линейными фрагментами. В последние годы много работ посвящено поиску и созданию материалов органической электроники среди веществ, имеющих жидкокристаллическую фазу.

Известен ряд работ по оценке взаимосвязи между подвижностью и структурой органических молекул [1–4]. Согласие с экспериментальными данными дает модель диффузии на делокализованном поляроне [5]. Модель учитывает значимые факторы, управляющие переносом носителей заряда: межмолекулярное связывание электронов, электрон-фононное взаимодействие, делокализацию заряда, статическое и динамическое разупорядочение. Мы предлагаем простой метод вычисления этих параметров, чтобы оценить вклад (приращение) различных молекулярных фрагментов в них и, в конечном счете, в подвижность. В [5] было получено следующее выражение для подвижности с учетом статического и динамического разупорядочения:

$$\mu = \mu_0 e^{\left(-\frac{2\sigma}{3kT}\right)^2} = \mu_0 e^{\left(-\frac{4(\sigma_s^2 + 2LkT)}{(3kT)^2}\right)}, \quad (1)$$

где подвижность носителей заряда  $\mu_0$  вычисляется по соотношению Эйнштейна–Смолуховского

$$\mu_0 = \frac{eD}{kT} = \frac{e}{6kT} \sum_i k_i r_i^2 p_i, \quad (2)$$

где  $D$  — коэффициент диффузии носителя заряда (полярона),  $r_i$  — расстояние между соседними молекулами вдоль  $i$ -го направления переноса,  $p_i$  — вероятность перемещения носителя заряда в этом направлении. Для расчетов необходимо знать статическую составляющую  $\sigma_s$  стандартного отклонения энергии молекулы в решетке, моделирующей систему, а также динамическую составляющую  $\sigma_d = \sqrt{2LkT}$  стандартного отклонения интеграла переноса заряда  $J$ , который описывает электронную связь между узлами.  $L$  — энергия возмущения решетки, соответствующая нелокальному электрон-фононному взаимодействию. В дополнение к интегралу  $J$  вычисляется параметр  $\lambda$ . Это энергия реорганизации узла, которая описывает локальное электрон-фононное взаимодействие. Эти параметры включены в выражение для скорости переноса заряда в моделирующей решетке:

$$k_i = \frac{J_i^2}{\hbar} \left(\frac{\pi n_{\min}}{\lambda kT}\right)^{1/2} e^{\left(-\frac{\lambda}{4n_{\min} kT}\right)}, \quad (3)$$

$n_{\min}$  — количество элементов решетки при минимальной энергии носителей заряда. Для  $n \gg 1$

$$n_{\min} = \frac{(2J - \lambda)^2}{\sigma_s^2 + 2LkT}. \quad (3.2)$$

Численная оценка  $\mu_0$  показана на рис. 1.



В расчетах интеграл  $J$  заменяется суммой абсолютных значений  $J_i$  при передаче заряда от некоторой молекулы к каждому из ее  $k$  соседей:

$$J_{\Sigma} = \sum_{i=1}^k |J_i|. \quad (3.3)$$

Для  $n_{\min}$  выражение для расчета подвижности:

$$n_{\min} \approx 1 + \frac{(J_{\Sigma} - \frac{\lambda}{2})^2}{\sigma_s^2 + 2LkT} h \left( J_{\Sigma} - \frac{\lambda}{2} \right). \quad (4)$$

В наших расчетах скорости переноса заряда между двумя молекулами или их частями мы использовали выражение (1) из статьи Сосорева [5], основанное на формуле Маркуса:

$$k_M = \frac{2\pi}{\hbar} j^2 \left( \frac{1}{4\pi\lambda kT} \right)^{1/2} e^{-\frac{(E_2 - E_1 - \lambda)^2}{4\lambda kT}} \quad (5)$$

где  $E_1$  и  $E_2$  — начальная и конечная энергия. Значения  $J$  и  $\lambda$  являются переменными параметрами. Подробности см. в [5]. Зависимости подвижности  $\mu$ , нормированной на  $\mu_0$ , от температуры и  $\sigma_s$  для значений параметра  $L = 5$  МэВ показаны на рис. 2.

**Выводы.** Используя модель диффузии на делокализованном поляроне [5], скорость переноса заряда между двумя органическими молекулами или их частями и подвижность носителей заряда были оценены с учетом электронной связи между зарядами, локального и нелокального электрон-фононного взаимодействия.

Когда энергия возмущения решетки, соответствующая нелокальному электрон-фононному взаимодействию, изменяется с 5 до 100 МэВ, подвижность уменьшается в 17 раз. Влияние статической составляющей  $\sigma_s$  более выражено при температурах, соответствующих условиям эксплуатации устройств. По мере увеличения  $\sigma_s$  подвижность  $\mu/\mu_0$  уменьшается. При высокой диффузии величина  $\mu$  может достигать  $\sim 40 \text{ В см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$  при  $T \sim 300 \text{ К}$  и  $\sim 120 \text{ В см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$  при  $T = 100 \text{ К}$ .

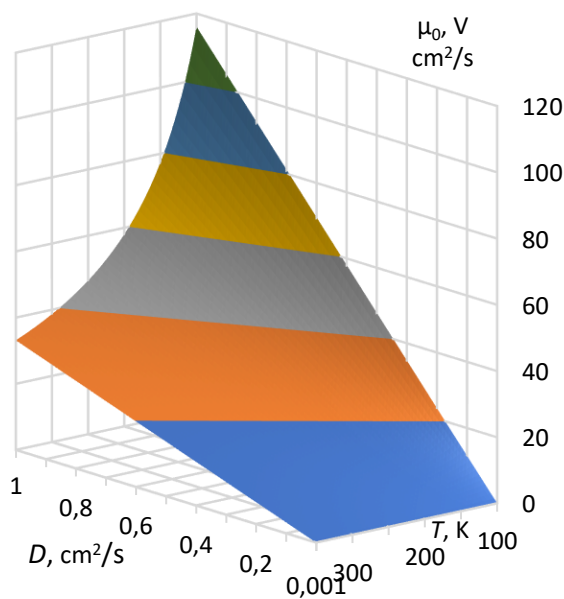


Рис. 1. Численная оценка зависимости  $\mu_0$  от  $D$  и  $T$

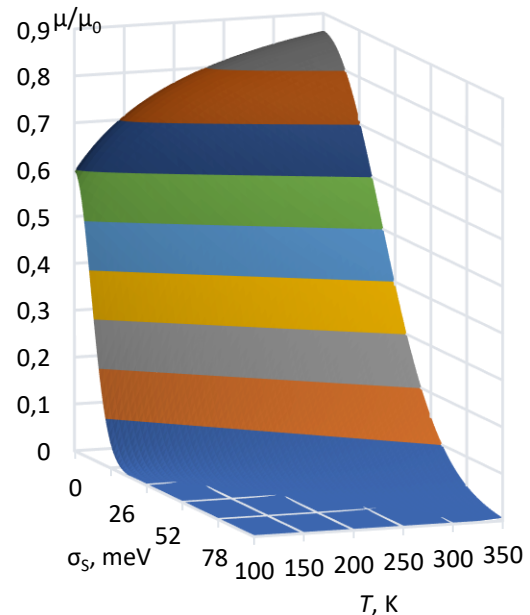


Рис. 2. Зависимости подвижности  $\mu/\mu_0$  от  $T$  и  $\sigma_s$  для значения параметра  $L = 5$  МэВ

Работа частично выполнена за счет гранта РФФ № 22-29-00466.

### Литература

1. Беляев В. В., Чилая Г. С. Жидкие кристаллы в начале XXI века. — М.: Мос. гос. обл. ун-т, 2015.
2. Belyaev V. V. Promising applications and technologies of liquid crystal displays and photonics devices // Zhidkie kristally i ikh prakticheskoe ispol'zovanie (Liquid Crystals and their Application, Russian Journal). 2015. V. 15(3). P. 7–27. DOI: 10.18083/LCAppl.2015.3.7.
3. Gowda A., Kumar S. Recent advances in discotic liquid crystal-assisted nanoparticles // Materials. 2018. V. 11(3): 382.

4. Yuvaraj A. R., Renjith A., Kumar S. Novel electron-deficient phenanthridine based discotic liquid crystals // J. Mol. Liq. 2018. V. 272. P. 583–589.
5. Sosorev A. Yu. Simple charge transport model for efficient search of high-mobility organic semiconductor crystals // Mater. Des. 2020. V. 192: 108730.

УДК: 535.3, 537.86

## Компьютерное моделирование параметров ноль-эпсилон (ENZ) материалов прозрачных электродов для устройств оптических телекоммуникаций с новыми функциональными возможностями

**В. В. Беляев<sup>1,2</sup>, А. С. Соломатин<sup>3</sup>, А. Х. Абдуев<sup>1,2</sup>, А. А. Беляев<sup>1</sup>, Е. В. Царева<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Государственный университет просвещения (ГУП),

<sup>2</sup>Российский университет дружбы народов

<sup>3</sup>Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева

Для ряда материалов пленок прозрачных электродов, применяемых в устройствах управления излучением ближнего ИК или ТГц диапазона, выполнено компьютерное моделирование влияния параметров материала ( $N$  — плотность электронов,  $\tau$  — среднее время рассеяния электронов) на величину частоты  $\omega_0$ , при которой диэлектрическая проницаемость материала  $\epsilon$  (эпсилон) становится близкой к нулю (так называемые ENZ-материалы, а в нашей работе ноль-эпсилон-материалы (НЭ-материалы)). Режим реализуется за счет образования таммовских плазмонных поляритонов в ближнем ИК или ТГц диапазоне для тонких пленок материалов прозрачных электродов на основе окислов металлов.

Благодаря своим свойствам (повышенная оптическая нелинейность и, соответственно, увеличенная длина волны и фазовая скорость) НЭ-материалы находят применение в субволновых электрооптических модуляторах, модуляторах с интенсивным взаимодействием света и вещества, глубоких субволновых каналах с ENZ-наполнением для нетрадиционной маршрутизации (варьирования направления распространения) электромагнитных волн, поглощающих слоях [1–3].

В соответствии с моделью Друде действительная часть диэлектрической проницаемости пересекает нуль на частоте  $\omega_0$ , которая определяется выражением

$$\omega_0^2 = \left[ q^2 / (\epsilon_0 \epsilon_\infty m^*) \right] N - \tau^{-2},$$

где  $q$  — элементарный заряд,  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная,  $\epsilon_\infty$  — диэлектрическая проницаемость материала на высокой частоте,  $m^*$  — эффективная масса электрона,  $N$  — плотность электронов,  $\tau$  — среднее время рассеяния электронов. Поскольку элементарный заряд, эффективная масса, вакуумная и высокочастотная диэлектрическая проницаемости примерно постоянны,  $\omega_0$  определяется преимущественно электронной плотностью и временем рассеяния.

На графиках показаны взаимозависимости параметров  $N$  — плотность электронов,  $\tau$  — среднее время рассеяния электронов при выполнении НЭ режима. Диапазоны изменения параметров для расчета выбраны по имеющимся в литературе данным по концентрации электронов различных материалов, применяемых в электронике.

При концентрациях порядка  $10^{19} \text{ см}^{-3}$  и времени рассеяния  $10^{-15} \text{ с}$  частотой  $\omega_0$ , при которой реализуется НЭ-режим, составляет от  $10^{14} \text{ с}^{-1}$  до  $10^{15} \text{ с}^{-1}$ . При концентрациях порядка  $10^{21} \text{ см}^{-3}$  и времени рассеяния  $10^{-16} \text{ с}$  частота  $\omega_0$ , при которой реализуется НЭ-режим, составляет от  $10^{15} \text{ с}^{-1}$  до  $1,6 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$ . При увеличении электронной концентрации, как правило, происходит уменьшение времени рассеяния электронов из-за уменьшения длины свободного пробега.

Увеличивая или уменьшая концентрацию электронов, можно добиться сдвига частоты НЭ режима в оптический или терагерцевый диапазон.

НЭ-режим может быть реализован в разрабатываемых нами материалах прозрачных электродов на основе оксида цинка за счет состава и структуры материала, технологии его изготовления. В поликристаллических оксидных слоях ZnO наблюдаются существенные изменения в концентрации и подвижности. Десорбция кислорода с поверхности межзеренных границ приводит к формированию на поверхности зерен высокой концентрации донорных центров. Легирование слоев элементами III группы (например, Al, Ga) периодической системы позволяет создавать прозрачные проводящие слои с удельными сопротивлениями вплоть до  $10^{-4} \text{ Ом} \cdot \text{см}$ .

Высокие концентрации свободных носителей в слоях на основе оксида цинка могут быть достигнуты в слоях со сложной структурой. В поликристаллических слоях со сложной пространственной локализацией донорных центров (Al и Ga) могут достигаться высокие концентрации и подвижности носителей заряда [4]. Эти структуры на основе аморфных оксидных слоев создают предпосылки для замены прозрачных электродов ИТО ( $\text{In}_2\text{O}_3\text{-SnO}_2$ ) в устройствах отображения информации или преобразования световой энергии.

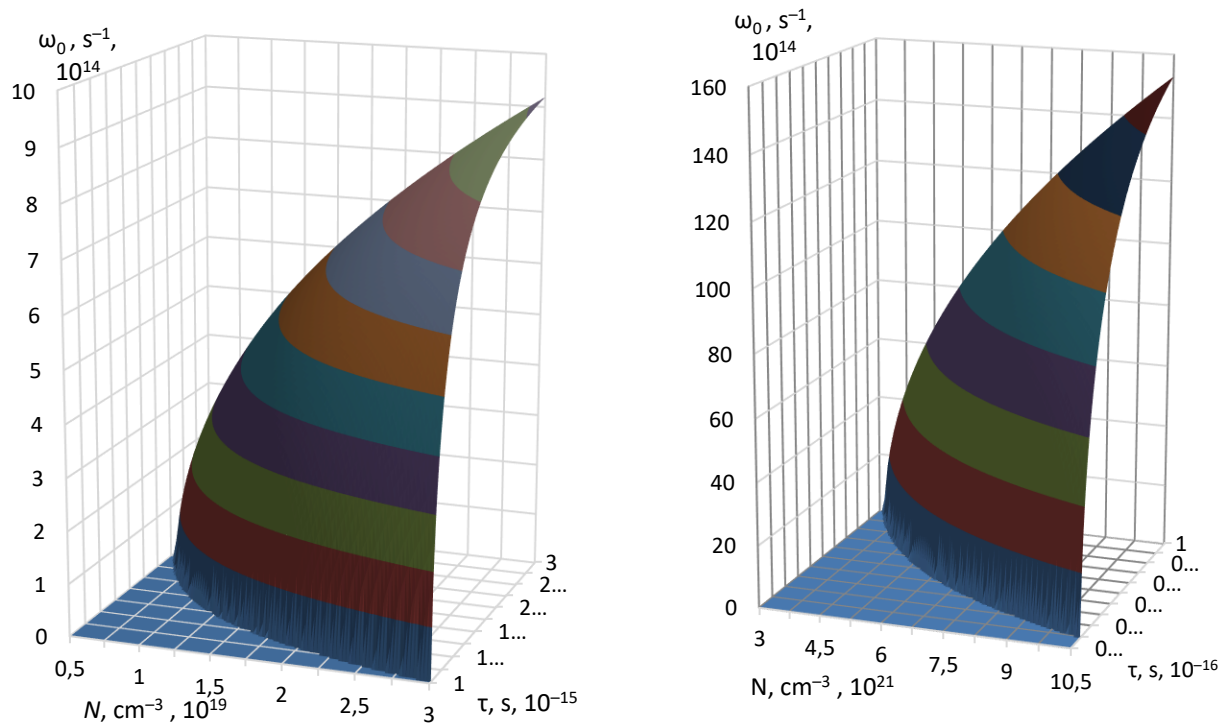


Рис. 1. Зависимости частоты перехода в НЭ-режим от параметров материала. Слева для времени  $\tau$  — время рассеяния электронов порядка  $10^{-15}$  с, справа для времени  $\tau$  — время рассеяния электронов порядка  $10^{-16}$  с

Кроме того, диэлектрические свойства НЭ-материала и частота  $\omega_0$  зависят не только от концентрации и времени рассеяния электронов, но и от структуры материала. В таком металл-диэлектрическом композите [5] плазменная частота и время рассеяния электронов зависят от размеров как ячейки композита, так и металлического включения, а также от их проводимости.

Таким образом, задача компьютерного моделирования НЭ-материалов для широкого диапазона спектра электромагнитных волн (ИК, ТГц, оптический и др.) требует варьирования в широких пределах самых различных параметров: плотность электронов, время рассеяния (релаксации) электронов, концентрация примесей и их электрофизические характеристики, микро- и макроструктура композитного материала и др. Разработка таких материалов и конструирование устройств различного назначения требует суперкомпьютерных средств.

Исследование частично выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-00466.

### Литература

1. *Silveirinha M. G., Alù A., Edwards B., Engheta N.* Overview of Theory and Applications of Epsilon-Near-Zero Materials // Proc. URSI. Paper Bo1p6 (2007). URL: <https://www.ursi.org/proceedings/procGA08/papers/B01p6.pdf> (дата обращения 13.03.2023).
2. *Baxter J., Pérez-Casanova A., Cortes-Herrera L., A. Calà Lesina, I. De Leon, Ramunno L.* Dynamic nanophotonics in epsilon-near-zero conductive oxide films and metasurfaces: a quantitative, nonlinear, computational model // Adv. Photonics Res. 2023. V. 4(2): 2200280. DOI: 10.1002/adpr.202200280.
3. *Secondo R., Khurgin J., Kinsey N.* Absorptive loss and band non-parabolicity as a physical origin of large nonlinearity in epsilon-near-zero materials // Opt. Mater. Express. 2020. V. 10(7). P. 1545–1560. DOI: 10.1364/OME.394111.
4. *Asvarov A., Abduev A., Akhmedov A., Kanevsky V.* On the effect of the co-introduction of Al and Ga impurities on the electrical performance of transparent conductive ZnO-based thin films // Materials (Basel). 2022. V. 15(17): 5862. DOI: 10.3390/ma15175862.

УДК 519.876.5

## Моделирование разделения газов, вызванного тепловым скольжением на кромке пластины с разнонагретыми сторонами

**Я. М. Жихарев<sup>1,2</sup>, Ф. Г. Черемисин<sup>1,3</sup>, Ю. Ю. Клосс<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>ФИЦ «Информатика и управление» РАН

В настоящее время наблюдается интерес к микроустройствам без движущихся частей, течение разреженных газов внутри которых происходит за счет разницы температур [1, 2]. В данной работе рассматривается устройство (рис. 1), в котором симметрично расположены последовательные пластины одинакового размера с различными температурами сторон. Из-за различных температур сторон пластин возникают температурные напряжения, и компоненты смеси газов текут с разной скоростью, что приводит к различному отношению концентраций в разных частях сосуда.

Поведение смеси газов описывается кинетическим уравнением Больцмана, которое для  $i$ -й компоненты смеси записывается в виде

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{x}} = \int (f_i' f_j' - f_i f_j) \left| \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} - \frac{\mathbf{p}_j}{m_j} \right| b d\mathbf{b} d\mathbf{v} d^3 \mathbf{p}_j.$$

В данной работе для вычисления интеграла столкновений используется консервативный проекционный метод [3]. При решении левой части кинетического уравнения используется явная разностная схема первого порядка на равномерной пространственной сетке.

Рассматривается смесь неона и аргона в модели твердых сфер. Их исходные температуры равны и совпадают с начальными температурами стенок и левых сторон пластин. Другие стороны имеют температуру  $T_2$ , отношение между которыми берется  $T_2 = 1,2T_1$ , так как это сравнительно легко реализуемо в экспериментах [2]. Рассматриваются устройства с различным числом и различным размером пластин. Размеры системы составляют несколько длин свободного пробега. Изначально газы имеют максвелловское распределение. В результате наблюдается изменение плотностей газов в правой и левой частях сосуда и соответственно разделение смеси (рис. 2).

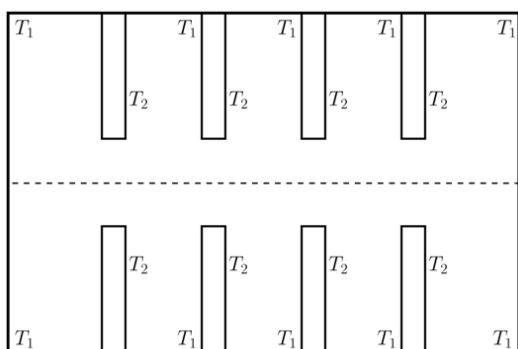


Рис. 1. Схема устройства

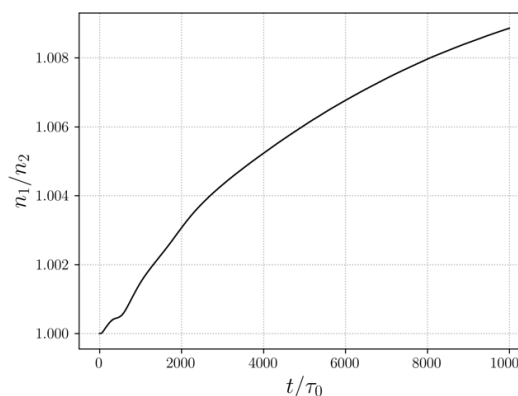


Рис. 2. Отношение концентраций в левой части устройства

## Литература

1. *Loftian A., Roohie E., Stefanov S.* Periodically patterned radiometric pumps: novel configurations and further applications // AIP Conference Proceedings. 2019. V. 2132: 190003.
2. *Matsumoto H., Yamagishi D., Morokuma T., Mihara K.* Study on a gas transport system based on thermal induced flow // Proc. of the International Symposium on Rarefied Gas Dynamics AIP. 2016. V. 1786: 200002.

3. Додулад О. И., Клосс Ю. Ю., Потапов А. П., Черемисин Ф. Г., Шувалов П. В. Моделирование течений разреженного газа на основе решения кинетического уравнения Больцмана консервативным проекционным методом // ЖВМ и МФ. 2016. Т. 56. № 6. С. 1008–1024.

УДК 544.25; 538.9

## Влияние наночастиц малослойных графитовых фрагментов на реологические свойства холестерического жидкого кристалла

Р. Н. Кучеров<sup>1,2</sup>, А. Д. Курилов<sup>1,2</sup>, А. И. Смирнова<sup>3</sup>, Н. В. Усольцева<sup>3</sup>, Д. Н. Чаусов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН

<sup>2</sup>Государственный университет просвещения

<sup>3</sup>Научно-исследовательский институт наноматериалов, Ивановский государственный университет

С целью изучения влияния на реологические свойства холестерических жидких кристаллов добавок углеродных наноструктур изучены дисперсии тридецилат холестерина (X-20) [1] с малослойными графитовыми фрагментами (МГФ) в концентрациях 0,005 и 0,02 мас.%. МГФ имеют прямоугольную форму и состоят из нескольких графитовых слоев (от 4 до 8), размер частиц не превышает 20 нм [2]. Равномерность распределения наночастиц и стабильность дисперсий достигалась методом ультразвукового диспергирования в изотропной фазе X-20 с последующим медленным охлаждением в мезофазе.

Исследования реологических параметров производили на динамическом реометре сдвига SmartPave 102e, Anton Paar, в сдвиговом (разрушающем) и осцилляционном (неразрушающем) режимах. Были получены абсолютные значения реологических параметров в геометрии измерения плоскость–плоскость при нагревании и охлаждении (точность удержания температуры 0,01 К, температурный градиент 0,1 К).

Добавление МГФ в жидкокристаллическую матрицу оказывает влияние на температурные зависимости поведения вязкости системы (рис. 1).

Результаты исследований демонстрируют возможность работы образцов при скоростях сдвига до 100 рад/с в хиральной нематической ( $N^*$ ) и изотропной (Iso) фазах. Наличие МГФ в матрице X-20 позволяет стабилизировать значения вязкости хиральной нематической фазы в режиме охлаждения во всем диапазоне скоростей сдвига, в то время как в чистом X-20 при тех же условиях наблюдалось резкое падение вязкости (рис. 1). Значения мнимой составляющей модуля сдвига в области  $N^*$  фазы при добавлении МГФ также увеличиваются.

Полученные данные могут быть использованы для управления реологическими свойствами мезогенов в условиях температурного воздействия при их использовании в электромеханических системах.

Работа выполнена с финансовой поддержкой Минобрнауки РФ (проект № FZZM-2023-0009 для Ивановского государственного университета). Авторы выражают благодарность Д. Н. Столбову за предоставление малослойных графитовых фрагментов для исследования.

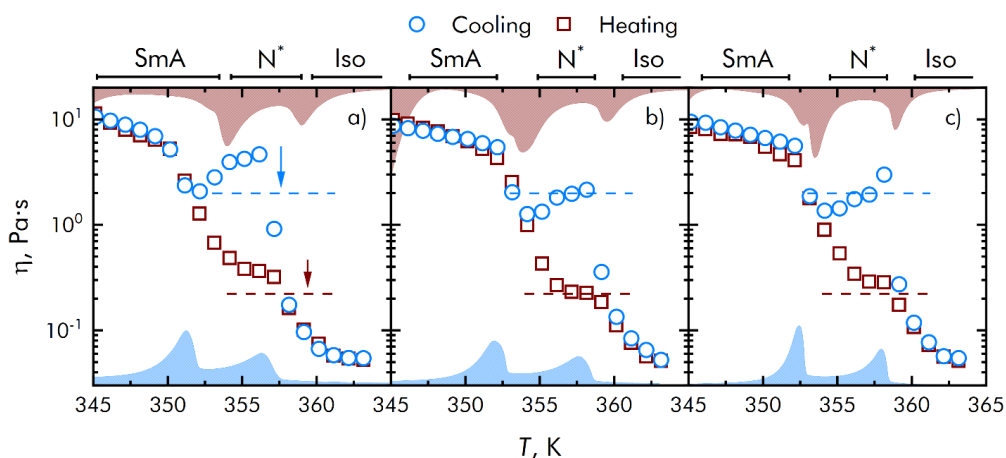


Рис. 1. Температурные зависимости сдвиговой вязкости композиций X-20/МГФ, полученные в осцилляционном режиме при  $\omega = 11$  рад/с, при концентрациях МГФ: а) 0 мас.%; б) 0,005 мас.%; в) 0,02 мас.%.

## Литература

1. *Chausov D. N.* [et al.]. Conductivity and dielectric properties of cholesteryl tridecylate with nanosized fragments of fluorinated graphene // *J. Mol. Liq.* 2019. V. 291: 111259.
2. *Chausov D. N.* [et al.]. Mesomorphism, dielectric permittivity, and ionic conductivity of cholesterol tridecylate doped with few-layer graphite fragments // *J. Mol. Liq.* 2023. V. 374: 121139.

УДК 533.72

### Моделирование однородно распределенного газа с потенциалом взаимодействия Леннарда–Джонса и разработка параллельных алгоритмов решения уравнения Больцмана с помощью проекционного метода

*Т. С. Волжин<sup>1,2</sup>, А. В. Нахаметян<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

В данной работе рассматривается моделирование газа с однородной по пространству функцией распределения. Известно, что динамика разреженного газа описывается кинетическим уравнением Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial f}{\partial y} + \xi_z \frac{\partial f}{\partial z} = J(f),$$

где  $J(f)$  — интегральный оператор, зависящий от функции распределения, а взаимодействие между молекулами описывается потенциалом Леннарда–Джонса:

$$U(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{d}{r} \right)^{12} - \left( \frac{d}{r} \right)^6 \right].$$

В работе исследуется случай однородного по пространству распределения:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = I(f).$$

Уравнение описывает релаксацию газа из некоторой неравновесной функции распределения в максвелловское распределение. В [1] рассматривается проекционный метод, позволяющий вычислить интеграл столкновений, используя консервативный по импульсу и энергии алгоритм и сетки интегрирования Коробова, основанные на дробных остатках. В пределе по числу узлов сетка равномерно заполняет пространство для интеграла столкновений, который согласно газовой динамике имеет вид:

$$I(\xi) = \int_0^{b_{\max}} \int_0^{2\pi} \int_{-\xi_{\text{cut}}}^{\xi_{\text{cut}}} \{f(\varphi(\xi, \xi_1, b, \varepsilon))f(\varphi_1(\xi, \xi_1, b, \varepsilon)) - f(\xi)f(\xi_1)\} |\xi_1 - \xi| b db d\varepsilon d\xi_1.$$

Это пятимерный интеграл, и при дискретизации пространства он имеет вид

$$I(\xi) = \frac{2\pi b_{\max} V_{\text{sph}}}{N_v} \sum_{v=1}^{N_v} \{f(\varphi_v(\xi))f(\varphi_{1v}(\xi)) - f(\xi)f(\xi_{1v})\} |\xi - \xi_{1v}| b_v.$$

Проекционный метод позволяет численно рассчитать данный интеграл с помощью 8-мерных сеток Коробова, каждый узел которых отвечает обработке одного смоделированного «случайным» образом столкновения молекул:

$$I_\gamma = \frac{b_{\max}^2 V_{\text{sph}} N_0}{4\sqrt{2} N_v} \sum_{v=1}^{\tilde{N}_v} [\delta_{\alpha_v, \gamma} + \delta_{\beta_v, \gamma} - (1 - r_v)(\delta_{\lambda_v, \gamma} + \delta_{\mu_v, \gamma}) - r_v(\delta_{\lambda_v + s_v, \gamma} + \delta_{\mu_v - s_v, \gamma})] \Omega_v,$$

$$\Omega_v = \{(f_{\lambda_v} f_{\mu_v})^{1-r_v} (f_{\lambda_v + s_v} f_{\mu_v - s_v})^{r_v} - f_{\alpha_v} f_{\beta_v}\} |\xi_{\alpha_v} - \xi_{\beta_v}|,$$

$$r_v = \frac{E_{0v} - E_{1v}}{E_{2v} - E_{1v}}, \quad E_{0v} = \xi_{\alpha_v}^2 + \xi_{\beta_v}^2, \quad E_{1v} = \xi_{\lambda_v}^2 + \xi_{\mu_v}^2, \quad E_{2v} = \xi_{\lambda_v + s_v}^2 + \xi_{\mu_v - s_v}^2,$$

где  $\gamma$  — узел на скоростной сетке,  $\alpha_\nu, \beta_\nu$  — узлы сетки Коробова  $\lambda_\nu, \mu_\nu, \lambda_\nu + s_\nu, \mu_\nu - s_\nu$  — узлы интерполяции разлетных скоростей.

В данной работе был реализован подход проекционного метода к вычислению интеграла столкновений, и при генерации узлов интегрирования учитывался угол смещения скорости центра масс при столкновении в соответствии с потенциалом Леннарда–Джонса. Формула определения угла разлета молекул [2]:

$$\theta(b) = \pi - 2M \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{dr}{r \sqrt{2\mu r^2(E - U(r)) - M^2}}, \quad M = gb\mu, \quad E = \frac{1}{2}\mu g^2, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2},$$

где параметр  $r_{\min}$  получается из соотношения

$$2\mu r_{\min}^2(E - U(r_{\min})) - M^2 = 0.$$

Для заданных параметров в потенциале находится единственный положительный корень методом Ньютона. В созданном программном пакете данный интеграл считается численно из-за сложности потенциала, хотя для более простого степенного потенциала легко получить аналитическую формулу.

Алгоритм был распараллелен, что ускорило вычисления в среднем в 3,6 раза. Была найдена сходимость начальной функции распределения к итоговой равновесной (максвелловской).

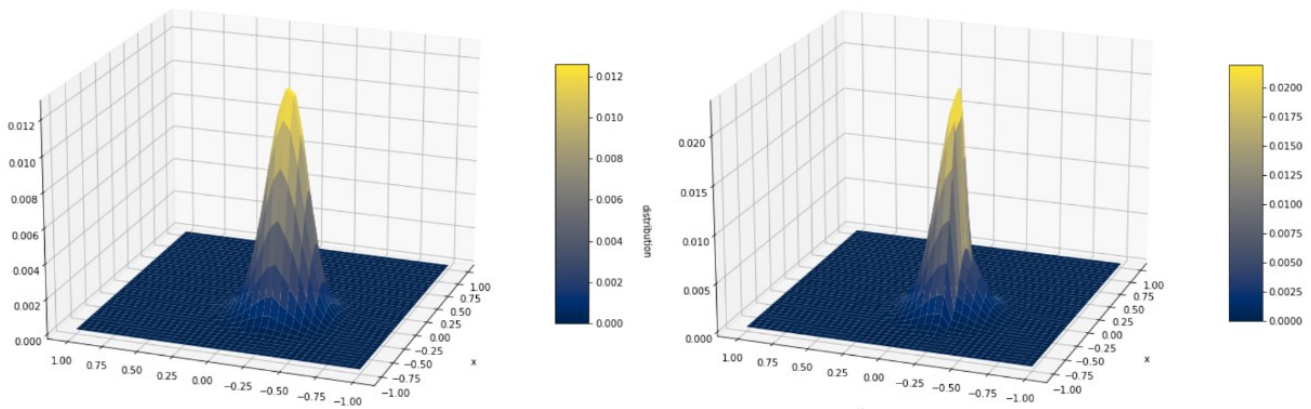


Рис. 1. Преобразование неравновесной функции в максвелловскую

Пример работы алгоритма на неравновесной функции распределения на рис. 1 (с некоторой безразмерной относительной температурой, графики созданы для функции с  $\tilde{T} = 0,3$ ) с формулой

$$f(\xi_\nu) = \begin{cases} \exp(-0,5\xi_\nu^2) & \xi_x > 0, \\ \tilde{T}^{-\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{0,5\xi_\nu^2}{\tilde{T}}\right) & \xi_x < 0. \end{cases}$$

Программный пакет для алгоритма был реализован на языке C++. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-07-00135.

### Литература

1. *Cheremisin F. G.* A conservative method for calculation of the boltzmann collision integral//Dokl. Phys. 1997. V. 42(11). P. 607–610.
2. *Коган М. Н.* Динамика разреженного газа. — М., Наука, 1967.

## Моделирование электромагнитных явлений с помощью параллельной гетерогенной программы TRT4 и исследование гетерогенного программирования

А. А. Грачков

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

Моделирование электромагнитных явлений с применением интегральных баз данных не является чем-то новым. В качестве показательного примера можно выделить программу по расчету радиационного излучения и прохождению элементарных частиц через вещество Geant4. Однако и у него есть существенные недостатки: отсутствие воксельной геометрии, невозможность ускорения за счет GPU, чрезмерная сложность.

Была разработана параллельная гетерогенная программа, моделирующая электромагнитные эффекты в кремнии в газовом приближении в промежутке энергий от 10 эВ до 1 МэВ. Были смоделированы три процесса: фотоэффект, комптон-эффект и рэлеевское рассеяние. Выбор данных реакций обусловлен их преобладающим вкладом в заданной области. На рис. 1 показана гистограмма углового распределения электронов в реакции фотопоглощения при энергии фотонов 5 кэВ и 100 кэВ. Можно видеть, что по мере увеличения энергии фотона направление вылетевших из атома электронов приобретает явно выраженный угол. Помимо этого, были получены угловые зависимости для разных энергий для процессов Релея и Комптона.

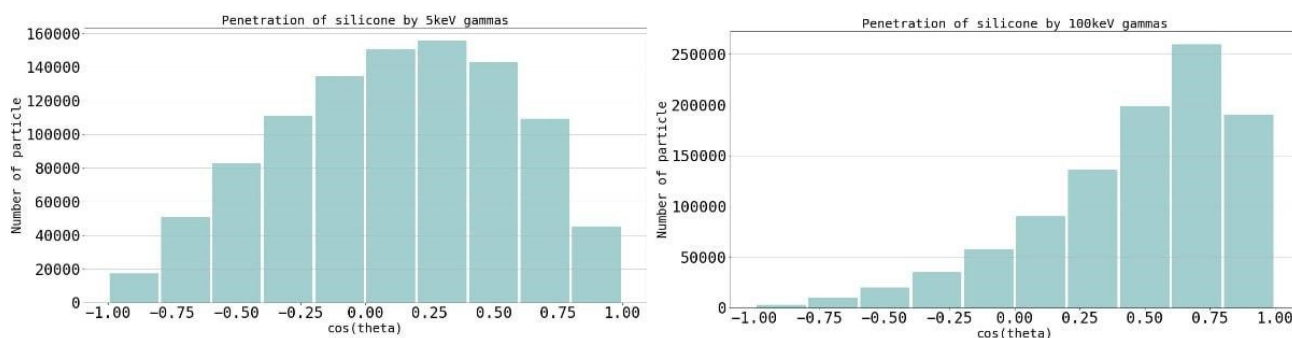


Рис. 1. Угловое распределение электронов в кремнии в реакции фотопоглощения при энергиях 5 кэВ и 100 кэВ

Помимо этого, было подвержено исследованию три гетерогенных компилятора, реализующих стандарт гетерогенного программирования SYCL. На рис. 2 показана зависимость времени расчета на одну частицу от количества частиц для различных архитектур процессоров и графических ускорителей с применением компилятора DPC++. Можно видеть, что видеокарта NVIDIA TITAN V показывает наименьшее значение выхода на плато на графике, что означает более высокую производительность на задачах с большим количеством частиц.

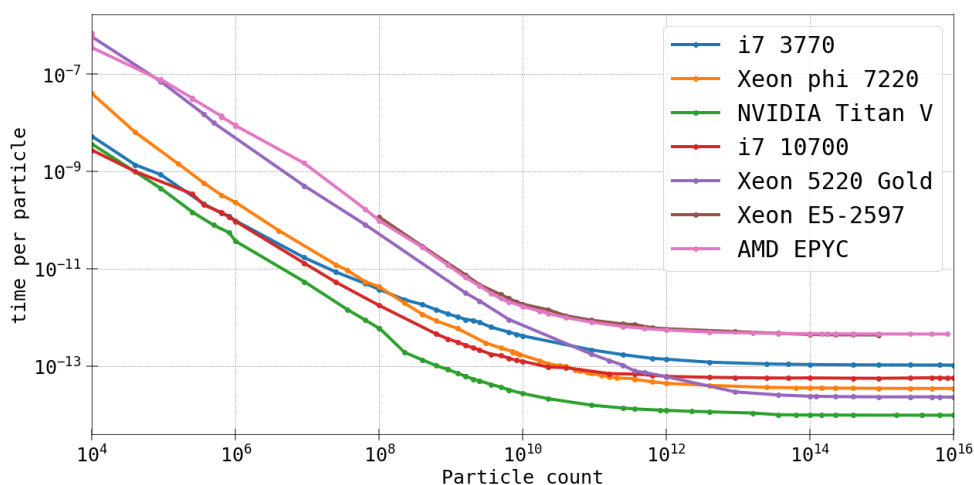


Рис. 2. Расчет времени, производимый на одну частицу, от общего количества частиц для разных платформ



Для общей оценки компиляторов была сформирована табл. 1, в которой для каждой испытанной архитектуры и компилятора была найдена константа времени измерения на частицу при больших количествах частей. Можно видеть, что для i7 3770 DPC++ на 10% быстрее, чем ComputeCPP, и на 74% быстрее, чем hipSYCL. Для Xeon Phi 7220, DPC++ на 50% быстрее, чем ComputeCPP, и на 90% быстрее, чем hipSYCL. Для NVIDIA TITAN V, DPC++ быстрее на 0,6%, чем ComputeCPP, на 0,5% быстрее, чем hipSYCL.

Т а б л и ц а 1. Значение времени расчета на одну частицу при пороговом значении для каждого устройства

Устройство	Тип	ComputeCPP	DPC++	HipSYCL
AMD EPYC	Серверный CPU	–	454,0	–
Xeon E5-2597	Серверный CPU	–	434,3	–
i7 3770	CPU	116,3	104,9	972,8
i10 10700	CPU	69	56,6	–
Xeon Phi 7220	Серверный CPU	70,5	34,5	904,9
Xeon Gold 5220	Серверный CPU	–	22,95	–
NVIDIA TITAN V	GPU	9,72	9,66	9,71

### Литература

1. *Agostinelli S., Allison J., Amako K.* Geant4-a simulation toolkit//Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. 2003. V. 506. P. 250–303.
2. *Reinders J.* Data parallel DPC++. — San Jost, USA: Intel, 2021.

УДК 553 6.011

## О функции распределения тяжелого компонента ударно-сжатой рэлеевской смеси газов

*М. М. Кузнецов, Ю. Д. Кулешова, В. И. Паренкина*

Государственный университет просвещения

В настоящее время возрос интерес к неоднородной релаксации рэлеевской смеси газов в ударной волне [1]. Рэлеевская смесь газов характеризуется тем, что является бинарной с сильно разделенными как по концентрациям, так и по массам составляющих компонентов, входящих в ее состав. При этом по составу преобладает легкий компонент, а по массам — тяжелый.

Ранее подробно в литературе разобран случай [2] неоднородной релаксации бинарной смеси, однако не являющейся рэлеевской. Отличие состоит в том, что концентрация в такой смеси легких компонентов  $n_l$  паритетна с концентрацией тяжелых компонентов  $n_h$ . Иерархия основных времен релаксации в такой смеси имеет следующий вид [2, 3]

$$\tau_{ll} \ll \tau_{hh} \ll \tau_{lh}, \quad (1)$$

где  $\tau_{ll}$ ,  $\tau_{lh}$ ,  $\tau_{hh}$  — времена релаксации соответственно легкого-легкого, легкого-тяжелого, тяжелого-тяжелого компонентов, к состояниям равновесия.

В рэлеевской смеси газов соответствующая иерархия времен имеет несколько другой вид:

$$\tau_{ll} \ll \tau_{lh} \ll \tau_{hh}, \quad (2)$$

Видно, что «перекрестное» время релаксации  $\tau_{lh}$  в иерархии (1) занимает крайнее правое положение, а в (2) находится в середине. Физически это означает, что общие равновесные макропараметры между легкой и тяжелой компонентами в случае (2) наступят значительно раньше, чем в случае (1). Причем окончательные равновесные значения макропараметров в случае (1) могут сильно различаться (на свою величину) в обоих состояниях локального равновесия, их подравнивание произойдет уже на масштабе  $\tau_{lh}$ .

В случае (2) подравнивание к равновесию произойдет также на масштабе  $\tau_{lh}$ . Релаксация же тяжелого газа на масштабе  $\tau_{hh}$  будет сопровождаться только малыми поправками к состоянию с почти выровненными макропараметрами на предыдущем масштабе  $\tau_{lh}$ .

Таким образом, мы видим, что случай (2) является, вообще говоря, менее общим случаем по сравнению с (1). Это особенно видно при рассмотрении предельного асимптотического перехода [4]

$$\frac{n_h}{n_l} \equiv v \rightarrow 0, \quad \frac{m_h}{m_l} \equiv b \rightarrow \infty, \quad \frac{n_h m_h}{n_l m_l} = v \cdot b \equiv \tilde{\rho} = \text{const} \ll 1. \quad (3)$$

В этом случае состояние равновесия, к которому пришел раньше всех легкий компонент, сохраняется неизменным и на временах релаксации тяжелого компонента к общему равновесию с легким.

Таким образом, задача о релаксации рэлеевского газа к состоянию равновесия в случае (3) разбивается (в главном порядке) на две отдельных:

1) релаксация легкого компонента к равновесному максвелловскому распределению с макропараметрами легкого компонента в его ударной волне;

2) релаксация тяжелого компонента, который вследствие сильного неравенства (3) дает малый вклад в общие законы сохранения потоков массы, импульса и энергии в общей ударно-сжатой среде рэлеевского газа совместно с тяжелым компонентом.

Наибольший интерес для практических приложений (таких как пиролиз в ударных волнах в целях получения атомов углерода с последующим многостадийным преобразованием их в наноматериалы) как раз и представляет случай (3).

Асимптотическая предельная модель среды, соответствующая второму предельному переходу [4],

$$\frac{n_h}{n_l} \equiv v \rightarrow 0, \quad \frac{m_h}{m_l} \equiv b \rightarrow \infty, \quad \frac{n_h m_h}{n_l m_l} = v \cdot b \equiv \tilde{\rho} = \text{const} \sim 1 \quad (4)$$

является математически более сложной.

Наиболее простое предельное решение получается в случае (2), поскольку функция распределения легкого компонента  $f_l$  на масштабе релаксации тяжелого компонента остается неизменной и равной значению максвелловского распределения этого компонента  $f_{ls}^{(M)}$  за ударной волной в обоих компонентах. Тяжелый компонент в результате своей релаксации приходит к равновесным значениям функции распределения  $f_h = f_{hs}^{(M)}$ . Изменение функции распределения тяжелого компонента  $f_h$  по масштабу своей релаксации удобно представить в виде суммы:

$$f_h(x) = f_{hs}^{(M)} - \Delta f_h(x), \quad (5)$$

где  $x$  — координата вдоль потока в ударной волне. Для добавки  $\Delta f_h(x)$  справедливо линейное дифференциальное уравнение первого порядка:

$$c_{hx} \frac{\partial}{\partial x} \Delta f_h(x) = \Delta f_h(x) \cdot Z(\vec{c}_h), \quad (6)$$

где  $Z(\vec{c}_h)$  — интегральное сечение взаимодействия молекул тяжелого компонента с легким [3]. Уравнение (6), как нетрудно показать, непосредственно следует из уравнения Больцмана для функции распределения тяжелого компонента  $f_h$  и предельного перехода (2).

### Литература

1. Кузнецов М. М., Кулешова Ю. Д. Асимптотическое обоснование эффекта перехлеста в сильно диспергированной смеси газов // Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ, 29.11–03.12.2021 г. Фундаментальная и прикладная физика. Секция моделирования кинетических и ядерных процессов. С. 185–186.
2. Осипов А. И. Релаксационные процессы в газах. 1. Неравновесное распределение энергии по поступательным степеням свободы // Физика горения и взрыва. 1966. № 4. С. 42–61.
3. Гордиец Б. Ф., Осипов А. И., Шелетин Л. А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. — М.: Наука. Физматлит, 1980.
4. Кузнецов М. М., Кулешова Ю. Д. Асимптотическое значение эффекта высокоскоростного перехлеста в ударно-сжатой смеси газа // Вестник МГОУ. Сер.: Физика–Математика. 2021. № 3. С. 39–56.

## Исследование влияния коэффициента диффузного отражения в коллиматоре на расходимость молекулярного пучка

Е. Комаров<sup>1</sup>, О. В. Воронова<sup>2</sup>, А. С. Рябушенко<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский институт»

Было проведено исследование влияния коэффициента диффузного отражения боковой поверхности коллиматора на расходимость молекулярного пучка. Уравнение Больцмана [1] решается с помощью консервативных конечно-разностных методов [2, 3] с помощью TVD-схемы [4]. Использовалась библиотека для подсчета интеграла столкновений [5, 6].

На боковой поверхности трубки коллиматора задается смешанное граничное условие с разными коэффициентами диффузного отражения. Коэффициент отражения  $\alpha$  имеет такой смысл, что доля функции распределения  $\alpha$  отражается диффузно, а  $1 - \alpha$  — зеркально:

$$f_{\text{res}} = \alpha \cdot f_{\text{diffusion}} + (1 - \alpha) \cdot f_{\text{mirror}}$$

В результате получено, что коэффициент не влияет на расходимость. Была проверена корректность моделирования — полная энергия и импульс сохраняются.

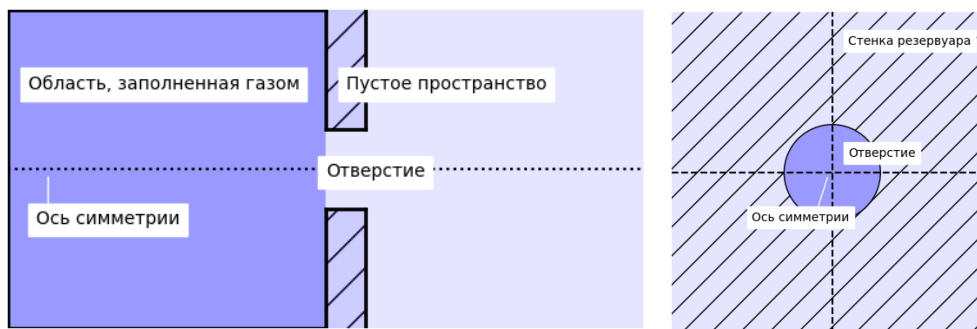


Рис. 1. Схема установки в модельной задаче

В работе моделировалось истечение газа из однородно заполненного резервуара в вакуум. Схема установки приведена на рис. 1. На стенках внутри резервуара диффузное граничное условие, на боковых стенках отверстия — смешанное, на остальных границах — нулевое (газ может покинуть область счета, но не возвращаться обратно).

В разработанное в ряде предыдущих работ приложение [7] была добавлена возможность указывать температуру и коэффициент диффузного отражения для стенок, на которых задаются граничные условия. Вычисления производились с использованием CUDA [8]. С помощью этого приложения смоделирована эволюция функции распределения, вычислена концентрация и посчитана расходимость пучка по методу, предложенному в [7].

Таблица 1. Итоговые параметры струи

$\alpha$	$a: R(x) = a \cdot x + b$	$\alpha = \text{tg}^{-1}a$
1	$0,414 \pm 0,002$	$22,5^\circ \pm 0,1^\circ$
0,75	$0,416 \pm 0,004$	$22,6^\circ \pm 0,2^\circ$
0,5	$0,416 \pm 0,002$	$22,6^\circ \pm 0,1^\circ$
0,25	$0,413 \pm 0,003$	$22,4^\circ \pm 0,2^\circ$
0	$0,414 \pm 0,004$	$22,5^\circ \pm 0,2^\circ$

Итоговые параметры струи для толщины стенки  $d_w = 2$  и радиуса отверстия  $r_h = 4$  представлены в табл. 1.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что коэффициент диффузного отражения не оказывает заметного влияния на расходимость пучка.

## Литература

1. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967.
2. Черемисин Ф. Г. Численное решение кинетического уравнения Больцмана для одномерных стационарных движений газа // ЖВМ и МФ. 1970. Т. 10. № 3. С. 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.
4. Самарский А. А., Вабичев П. Н. Аддитивные схемы для задач математической физики. — М.: Наука, 2001.
5. Черемисин Ф. Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Докл. РАН. 1997. Т. 357. № 1. С. 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. Komarov E., Kloss Yu. Yu., Tcheremissine F. G. Simulation and analysis of physical characteristics of a molecular beam in a collimator using methods of kinetic theor // J. Phys. Conf. Ser. 2020. V. 1560: 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 // J. Comput. Graphical Stat. 2010. V. 19. P. 419–438.

УДК 519.876.5

### Влияние граничных условий на стенке трубки коллиматора на расходимость молекулярного пучка

Е. Комаров<sup>1</sup>, Ю. Ю. Клосс<sup>1,2</sup>, Ф. Г. Черемисин<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup> ФИЦ «Информатика и управление» РАН

В данной работе исследуется влияние граничных условий на стенке трубки коллиматора на расходимость молекулярного пучка. Осуществляется численное решение уравнения Больцмана [1] и показывается, что изменение температуры стенки влияет на расходимость пучка. При нагреве стенки расходимость увеличивается, при охлаждении — уменьшается. Проводятся проверки корректности моделирования — выполнение закона сохранения энергии и импульса.

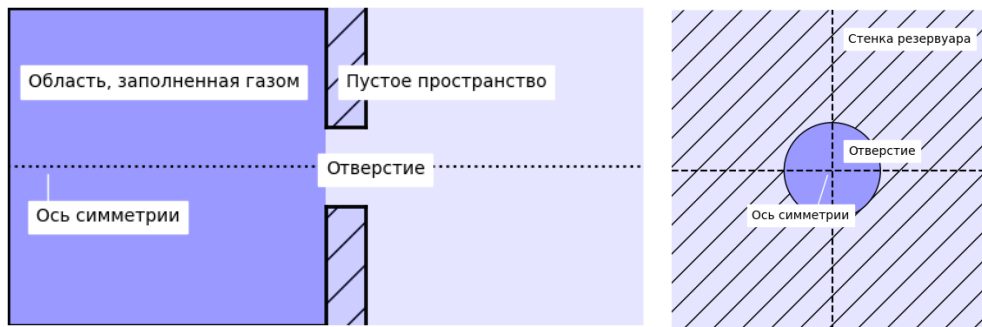


Рис. 1. Схема установки в модельной задаче

Для определения влияния температуры стенки решалась модельная задача, схема которой приведена на рис. 1. В задаче газ истекает из резервуара в вакуум через круглое отверстие. Перед началом моделирования газ однородно распределен в области внутри резервуара, за его пределами — вакуум. На стенках резервуара диффузное граничное условие, на стенках трубки — смешанное с коэффициентом диффузного отражения 0,5, на остальных границах области счета — нулевое.

Численное решение уравнения Больцмана осуществлялось консервативными методами [2, 3] с использованием TVD-схемы второго порядка [4]. Интеграл столкновений вычислялся с помощью сторонней библиотеки [5, 6].

В приложение, использованное для решения УБ в предыдущих работах [7], была добавлена возможность указывать температуру и коэффициент диффузного отражения в граничных условиях. Использовались возможности задавать произвольные начальные и граничные условия, которые дает это приложение. Вычисления производились с помощью CUDA [8].

Решение УБ позволило проследить эволюцию функции распределения, вычислить концентрацию и посчитать расходимость молекулярного пучка методом, предложенным в работе [7].

Итоговые параметры струи для толщины стенки  $d_w = 2$  и радиуса отверстия  $r_h = 4$  представлены в табл. 1.

Т а б л и ц а 1. Итоговые параметры струи

$T/T_0$	$a: R(x) = a \cdot x + b$	$\alpha = \text{tg}^{-1} a$
1	$0,414 \pm 0,002$	$22,5^\circ \pm 0,1^\circ$
0,75	$0,378 \pm 0,002$	$20,7^\circ \pm 0,1^\circ$
0,5	$0,321 \pm 0,006$	$17,8^\circ \pm 0,3^\circ$
1,5	$0,441 \pm 0,002$	$23,7^\circ \pm 0,2^\circ$
2	$0,492 \pm 0,008$	$26,2^\circ \pm 0,4^\circ$

Полученные результаты свидетельствуют о том, что нагрев стенок трубки увеличивается расходимость итогового пучка.

### Литература

1. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967.
2. Черемисин Ф. Г. Численное решение кинетического уравнения Больцмана для одномерных стационарных движений газа // ЖВМ и МФ. 1970. Т. 10. № 3. С. 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.
4. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Аддитивные схемы для задач математической физики. — М.: Наука, 2001.
5. Черемисин Ф. Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Докл. РАН. 1997. Т. 357. № 1. С. 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. Komarov E., Kloss Yu. Yu., Tcheremissine F. G. Simulation and analysis of physical characteristics of a molecular beam in a collimator using methods of kinetic theor // J. Phys. Conf. Ser. 2020. V. 1560: 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 // J. Comput. Graphical Stat. 2010. V. 19. P. 419–438.

УДК 519.876.5

## Моделирование и анализ процесса формирования ударных волн в микроканалах для неравновесных газокинетических процессов

*И. А. Кузенкова<sup>2</sup>, И. В. Говорун<sup>1,2</sup>, Е. Л. Остапов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>НИЦ «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].

Моделируемая ударная труба является геометрически однородной и представляет собой плоский (двумерный) канал, длина которого существенно превышает ширину. В начальный момент времени ударная труба разделена непроницаемой перегородкой на два отсека, условно названных толкающей и измерительной секциями (рис. 1). Обе секции заполнены одинаковым газом — аргоном. Такой выбор газа обусловлен тем, что аргон часто используется в реальных экспериментах с ударными волнами вследствие своей сравнительной дешевизны и нейтральности. 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.

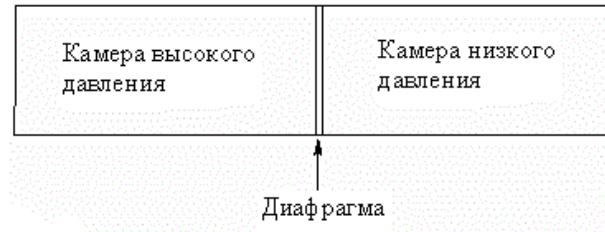


Рис. 1. Схематическое изображение ударной трубы

Распад начального разрыва давления при резком удалении перегородки создает ударную волну, которая движется внутри измерительной секции. В работе рассматривается двумерное плоское течение, что соответствует течению в щели, и два типа 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:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = I(\xi, \mathbf{x}, t). \quad (1)$$

Для описания пространственной геометрии задачи используется прямоугольная равномерная сетка. Параметры газа вычисляются при помощи численного интегрирования по скоростной векторной переменной  $\xi = \frac{\mathbf{p}}{m}$  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

$$I(\xi, \mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{b_{\max}} (f' f'_1 - f f_1) g b \cdot d\mathbf{b} d\mathbf{\varepsilon} d\xi.$$

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 и 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, 20-08-00482) и НИЦ «Курчатовский институт» (приказ № 1919 от 25.09.2020 г.).

## Литература

1. Miyoshi N. [et al.]. Development of ultra small shock tube for high energy molecular beam source // AIP Conference Proceedings. 2009. V. 1084. P. 557–562.

## Математическое моделирование и анализ работы многотрубчатого микронасоса Кнудсена при разделении газовых смесей

*И. В. Говорун<sup>1,2</sup>, М. Б. Федерова<sup>2</sup>, Л. А. Сазыкина<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

В газокинетической теории для расчета течения газа часто используется уравнение Больцмана, которое может быть представлено в следующем виде:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{p^i}{m^i} \frac{\partial f_i}{\partial x} = \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{b_m} (f_j' f_i' - f_i f_j) g_{ij} b \, db \, de \, d\mathbf{p}_j,$$

где  $f_i = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}_i)$ ,  $f_j = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}_j)$ ,  $f_j' = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}_j')$ ,  $f_i' = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}_i')$ , — функции распределения газов;  $t$  — время;  $\mathbf{p}$  — импульс молекул;  $m$  — масса частиц;  $g$  — относительная скорость при столкновении;  $b, e$  — параметры столкновения;  $\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j, \mathbf{p}_j', \mathbf{p}_i'$  — импульсы частиц до и после столкновения. Левая часть уравнения описывает движение частиц. 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  $\sigma$  и  $\epsilon$  определяются экспериментально и приведены. Метод вычисления интеграла столкновений для простого газа и смеси газов использует кубатурные сетки Коробова.

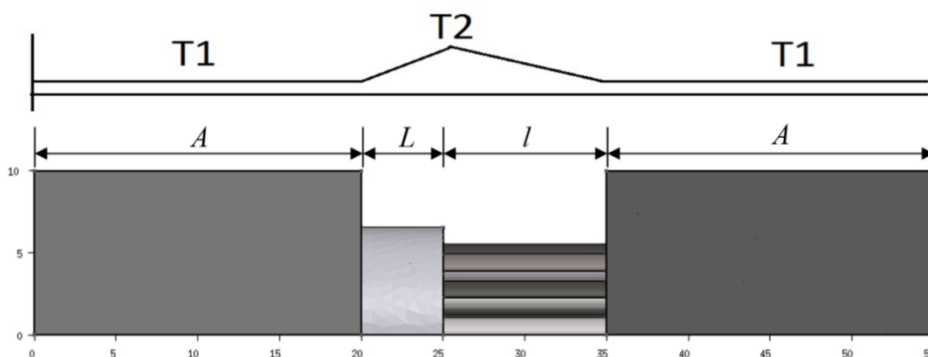


Рис. 1. Продольный вид установки с заданным на поверхностях распределением температуры

График температуры стенок представлен на рис. 1. Первая часть установки — резервуары с газом (на рисунке имеют длину  $A$ ), вторая часть — цилиндрическая трубка длиной  $L$ , на стенках которой поддерживается температурный градиент, третья часть — несколько тонких трубок (длиной  $l$ ), стенки также с температурным градиентом. Отношение  $T2/T1 = 1,3$ . 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.

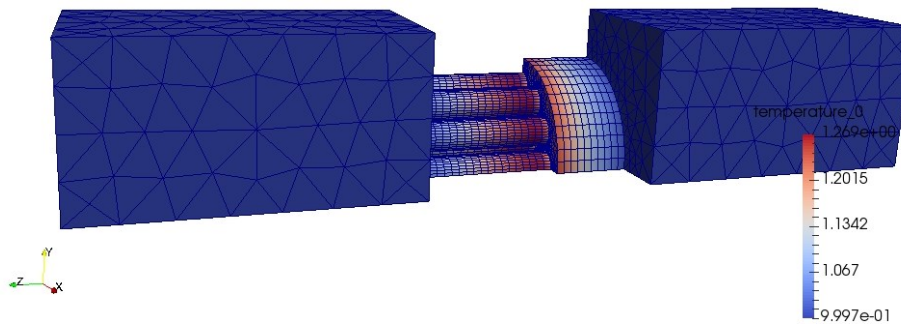
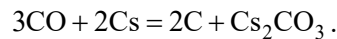


Рис. 2. Общий вид пространственной сетки в призматическо-тетраэдрической пространственной дискретизации

Примесные газы, в частности монооксид углерода, взаимодействуют с паром цезия при температуре ниже 1000 К при относительно высоких давлениях, что приводит к образованию конденсированных фаз углерода и карбоната цезия по реакции



Конденсация углерода и карбоната цезия на стенках отверстий в испарителе может приводить к изменению их геометрии и, возможно, полному перекрытию потока цезия и газов. Это заметным образом повлияет на давления газов в МЭЗ и приведет к снижению выходной электрической мощности ЭГК. В связи с этим необходимо провести моделирование газодинамических процессов в ГПРТ на пусковом режиме и определить максимальные потоки монооксида углерода, при которых не происходит конденсация карбоната цезия.

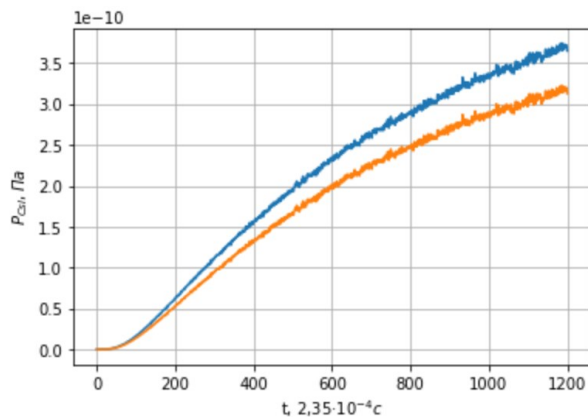


Рис. 3. Изменение давления — парциальное  $\text{CsI}_{113} + \text{CsI}_{138}$  и  $\text{CsI}_{133}$

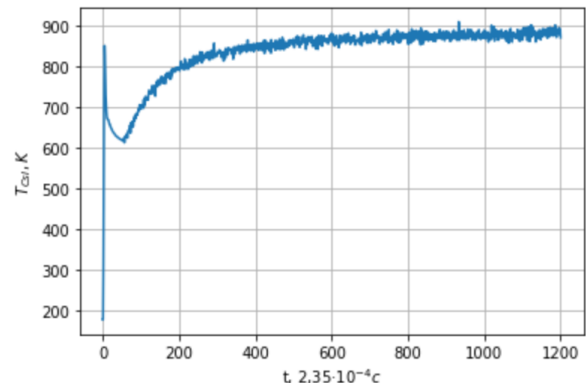


Рис. 4. Изменение температуры  $\text{CsI}$

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 20-08-00477, 20-07-00135, 20-08-00634).

### Литература

1. Коган М. Н. Динамика разреженного газа (кинетическая теория). — М.: Наука, 1967.
2. Гаспарян М. М. Солвер для решения уравнения Больцмана на неструктурированных сетках и его применение для изучения многотрубчатого микронасоса Кнудсена. — М.: МФТИ, 2018.
3. Гирифельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: ИИЛ, 1961.
4. Черемисин Ф. Г. Введение в консервативный проекционный метод вычисления интеграла столкновений и метод решения уравнения Больцмана. — М.: МФТИ, 2015.
5. Додулад О. И. Разработка многоточечных проекционных методов вычисления интеграла столкновений Больцмана и их алгоритмической и программной реализации. — М.: МФТИ, 2015.



## Зависимость ЭДС самоиндукции тонкой цилиндрической проволоки из металла от механизма поверхностного рассеяния электронов

Э. В. Завитаев<sup>1</sup>, К. Е. Харитонов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана  
(национальный исследовательский университет), Мытищинский филиал

<sup>2</sup>Государственный гуманитарно-технологический университет

Электрические и магнитные свойства проводников, линейный размер которых сравним с длиной свободного пробега электронов  $\Lambda$ , существенно отличается от свойств «массивных» проводящих объектов.

Вопросы, касающиеся расчета электрической проводимости тонкой цилиндрической проволоки из металла, обсуждались в работах [1, 2]. Зависимость самоиндукции внутри такой проволоки от механизма поверхностного рассеяния электронов определялась в работе [3]. В упомянутых работах применяется подход, основанный на решении кинетического уравнения Больцмана, для электронов в металле.

В данной работе рассматривается цилиндрическая проволока из немагнитного металла (относительная магнитная проницаемость  $\mu \approx 1$ ) радиуса  $R$  и длины  $D$  (будем считать, что  $D \gg R$ ), к концам которой приложено переменное электрическое напряжение частоты  $\omega$ . Принимается, что направление электрического поля совпадает с осью цилиндра. Скин-эффект не учитывается (предполагается, что  $R < \gamma$  — глубины скин-слоя).

Однородное периодическое по времени  $t$  электрическое поле, вектор напряженности которого  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$ , воздействует на электроны проводимости внутри проволоки и вызывает появление внутри нее высокочастотного тока с плотностью  $\mathbf{j}$ .

Проведем расчет ЭДС самоиндукции, обусловленной изменением силы тока  $I$  внутри проволоки.

Как известно, применяя к явлению самоиндукции закон Фарадея, получим, что ЭДС самоиндукции

$$\mathcal{E}_s = -L \frac{dI}{dt}, \quad (1)$$

где  $L$  (самоиндукция) — это коэффициент пропорциональности между магнитным потоком  $\Phi$  и силой тока  $I$ , создающей магнитное поле ( $L = \Phi/I$ ).

Так как электрическое поле  $\mathbf{E}$  однородное и периодическое по времени  $t$ , следовательно, то же самое можно сказать и про силу тока  $I$ , которая возникает под действием данного электрического поля:

$$I = I_0 \exp(-i\omega t) \Rightarrow \frac{dI}{dt} = -i\omega I_0 \exp(-i\omega t) = -i\omega I. \quad (2)$$

Поэтому ЭДС самоиндукции можно переписать в виде

$$\mathcal{E}_s = i\omega LI. \quad (3)$$

Выражение для силы тока  $I$  через поперечное сечение тонкой цилиндрической проволоки, где в качестве граничного условия используется зависимость коэффициента зеркальности  $q$  от дефектов поверхности  $H$  и угла падения электронов  $\theta$  на внутреннюю поверхность проволоки (модель Соффера), получено в работе [2]. Данное граничное условие можно записать в следующем виде:

$$q(H, \cos\theta) = \exp\left(- (4\pi H)^2 \cos^2\theta\right), \quad \cos\theta = \rho \cos\alpha, \quad H = \frac{h_s}{\lambda_F},$$

где  $h_s$  — среднеквадратичная высота поверхностного рельефа,  $\lambda_F$  — длина волны де Бройля электрона на поверхности Ферми.

Тогда

$$I = \frac{6ne^2 R^3 E_z}{v_F m} \iiint_{000}^{11\pi} \frac{\xi \rho \sqrt{1-\rho^2}}{v} \left( \frac{\left( \exp\left(- (4\pi H)^2 \cos^2\theta\right) - 1 \right) \exp(-v\eta/\rho)}{1 - \exp\left(- (4\pi H)^2 \cos^2\theta\right) \exp(-v\eta_0/\rho)} + 1 \right) d\xi d\rho d\alpha, \quad (4)$$

где

$$\xi = \frac{r_{\perp}}{R}, \quad \rho = \frac{v_{\perp}}{v_F}, \quad v = \left( \frac{1}{\tau} - i\omega \right) \frac{R}{v_F}, \quad \eta = \xi \cos \alpha + \sqrt{1 - \xi^2 \sin^2 \alpha}, \quad \eta_0 = 2\sqrt{1 - \xi^2 \sin^2 \alpha}.$$

Здесь  $\mu_0$  — магнитная постоянная вакуума;  $n$ ,  $e$ ,  $m$  — соответственно концентрация, заряд и масса электронов;  $v_F$  — скорость Ферми;  $\tau$  — электронное время релаксации.

Самоиндукция  $L$ , обусловленная магнитным полем внутри проволоки, была определена в работе [3]:

$$L = \mu_0 D \frac{J_{\Phi}}{J_I}, \quad (5)$$

где

$$J_{\Phi} = \frac{3}{\pi} \int_0^1 \int_0^1 \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \frac{\xi \rho \sqrt{1 - \rho^2}}{\delta v} \left( \frac{\exp\left(- (4\pi H)^2 \cos^2 \theta\right) - 1}{1 - \exp\left(- (4\pi H)^2 \cos^2 \theta\right) \exp(-v\eta/\rho)} \right) \exp(-v\eta/\rho) + 1 \, d\delta \, d\xi \, d\rho \, d\alpha,$$

$$J_I = 6 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^{\pi} \frac{\xi \rho \sqrt{1 - \rho^2}}{v} \left( \frac{\exp\left(- (4\pi H)^2 \cos^2 \theta\right) - 1}{1 - \exp\left(- (4\pi H)^2 \cos^2 \theta\right) \exp(-v\eta_0/\rho)} \right) \exp(-v\eta_0/\rho) + 1 \, d\xi \, d\rho \, d\alpha.$$

Подставив (4) и (5) в формулу (3), получаем искомую ЭДС самоиндукции  $\mathcal{E}_s$ , обусловленную изменением силы тока  $I$  внутри проволоки.

### Литература

1. *Завитаев Э. В., Юшканов А. А.* Высокочастотная проводимость тонкой цилиндрической проволоки из металла // Микроэлектроника. 2008. Т. 37. № 6. С. 429–438.
2. *Кузнецова И. А., Чапкин А. В., Юшканов А. А.* Влияние механизма поверхностного рассеяния электронов на высокочастотную проводимость тонкой металлической проволоки // Микроэлектроника. 2011. Т. 40. № 1. С. 45–51.
3. *Завитаев Э. В., Харитонов К. Е., Юшканов А. А.* Зависимость самоиндукции тонкой цилиндрической проволоки из металла от механизма поверхностного рассеяния электронов // Журнал технической физики. 2019. Т. 89. № 5. С. 643–645.

УДК 519.876.5

## Разработка алгоритма численного решения кинетического уравнения Больцмана на основе проекционного метода и его ускорение

*Я. М. Жихарев<sup>1,2</sup>, К. И. Баженов<sup>2</sup>, Т. П. Бельцевич<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

В данной работе описывается алгоритм моделирования смеси разреженных газов. Поведение системы описывается системой из уравнений Больцмана, при решении которой применяется метод расщепления, т. е. поочередно решаются уравнения переноса и уравнения релаксации. Для вычисления интеграла столкновений используется консервативный проекционный метод [1], а для решения уравнения переноса явная схема первого порядка. Чтобы уменьшить размер используемых сеток интегрирования, отрицательные значения пересчитываются с помощью симметричного проекционного метода [2].

На каждом временном шаге необходимо генерировать новые сетки Коробова [3], явно рассчитывать соударения газов и находить узлы проецирования как для газов одного типа, так и для межкомпонентных соударений. Задачи релаксации также решаются отдельно для каждого узла пространственной сетки. Независимость этих операций позволяет выполнять их параллельно в несколько потоков с помощью OpenMP и std::thread из стандартной библиотеки C++, что приводит к ускорению работы программы по сравнению с последовательной версией.

Расчеты проводятся для плоского устройства с последовательностью разнонагретых пластин внутри. Для сокращения объема вычислений расчеты проводятся только в одной из половин устройства

в силу симметрии относительно штриховой линии (рис. 1). На границах сосуда и пластинах используется условие диффузного отражения, на линии симметрии — зеркального отражения.

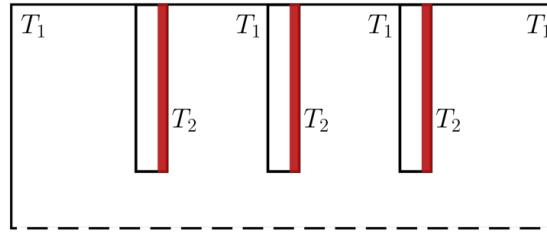


Рис. 1. Область, используемая для расчетов

### Литература

1. Додулад О. И., Клосс Ю. Ю., Потанов А. П., Черемисин Ф. Г., Шувалов П. В. Моделирование течений разреженного газа на основе решения кинетического уравнения Больцмана консервативным проекционным методом // ЖВМ и МФ. 2016. Т. 56. № 6. С. 1008–1024.
2. Tcheremissine F. G. Testing and acceleration of the conservative projection method for solving Boltzmann kinetic equation // AIP Conference Proceedings. 2015. V. 1648: 230005.
3. Коробов Н. М. Теоретико-числовые методы в приближенном анализе. — М.: Физматгиз, 1963.

УДК 533.72

## Программный комплекс для численного решения задачи релаксации неравновесного газа в приближении потенциала твердых сфер

*А. В. Нигоян*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

**Аннотация.** В рамках работы реализован программный комплекс для численного решения уравнения Больцмана в случае пространственно-однородного неравновесного состояния газа в приближении потенциала твердых сфер. Корректность получаемого при помощи имплементированного фреймворка решения подтверждена релаксацией функции распределения неравновесного газа, состоящего из двух компонент, движущихся с одинаковыми скоростями в противоположные стороны, к равновесному состоянию — распределению Максвелла с нулевой средней скоростью. Программный комплекс потенциально может быть использован для описания поведения электронов и фононов в полупроводниковых материалах и металлах, для моделирования транспортных потоков на автомагистралях, а также в клеточной динамике.

**Постановка задачи и используемые приближения.** Кинетическое уравнение Больцмана в трехмерном случае имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial f}{\partial y} + \xi_z \frac{\partial f}{\partial z} = J(f),$$

где  $f(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\xi})$  — функция распределения,  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_x; \xi_y; \xi_z)$  — параметр скорости,  $J(f)$  — нелинейный интегральный оператор, называемый интегралом столкновений.

Для пространственно-однородной функции распределения  $f = f(t, \boldsymbol{\xi})$ , в связи с чем ее эволюция задается следующим уравнением:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = J(f).$$

Для решения уравнения используется явный вид интеграла столкновений, учитывающий только парные столкновения, а также полученный в предположении молекулярного хаоса и плавной скорости изменения функции распределения на расстояниях порядка диаметра взаимодействия [1]:

$$J(f) = \int [f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}', t) \cdot f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}'_1, t) - f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) \cdot f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}_1, t)] g b db d\varepsilon d\xi_1,$$

где  $\boldsymbol{\xi}$  и  $\boldsymbol{\xi}_1$  — скорости частиц до столкновения,  $\boldsymbol{\xi}'$  и  $\boldsymbol{\xi}'_1$  — скорости частиц после столкновения,  $g = |\boldsymbol{\xi}_1 - \boldsymbol{\xi}|$  — модуль относительной скорости частиц,  $b$  — прицельный параметр,  $\varepsilon$  — угол между конечной скоростью частиц в системе центра масс и относительной скоростью  $\mathbf{g} = \boldsymbol{\xi}_1 - \boldsymbol{\xi}$ .

Несмотря на существенное упрощение интегро-дифференциального уравнения Больцмана в рассматриваемом случае, его точное решение для произвольного начального условия все еще не может быть выражено аналитически, поэтому для получения эволюции функции распределения прибегают к различным численным методам. В реализованном программном комплексе предусмотрено две возможности для численного интегрирования столкновений: первая — использование равномерной сетки, вторая — использование сеток Коробова [2]. В реальных расчетах приоритетным считается второй способ в силу большей точности получаемого решения; использование равномерной сетки рационально только с точки зрения ускорения расчетов.

Счет интеграла столкновений осуществляется проекционным методом [3, 4]. Для получения эволюции функции распределения во времени используется простейшая разностная схема первого порядка с заданным пользователем постоянным шагом  $\tau$ .

**Описание фреймворка.** Разработанный программный комплекс представляет из себя гибкий с точки зрения возможных доработок фреймворк на языке Python. Все вычисления реализованы с использованием функций библиотеки numpy, имплементированных на C++, в связи с чем достигнут компромисс между удобством с точки зрения разработки и скоростью расчетов. Входными параметрами для расчета являются:

количество узлов  $N_v$  вдоль одной оси скоростной сетки;

порог по модулю скорости  $\xi_{\text{cut}}$  для интегрирования (в единицах  $\xi_{\text{KB}} = \sqrt{\frac{kT}{m_0}}$ );

максимальное значение прицельного параметра  $b_{\text{max}}$ ;

метод численного интегрирования — равномерная сетка/сетка Коробова;

шаг интегрирования по времени  $\tau$ .

По умолчанию  $N_v = 20$ ,  $\xi_{\text{cut}} = 4,8$ ,  $b_{\text{max}} = 1$ ,  $\tau = 0,01$ , используется сетка Коробова.

**Проверка корректности реализованных функций.** Для проверки фреймворка построено решение для релаксации неравновесного газа, состоящего из двух компонент, движущихся с одинаковыми скоростями в противоположные стороны (рис. 1). Как можно видеть, предельной функцией является распределение Максвелла с нулевой средней скоростью, что является подтверждением корректной работы комплекса программ.

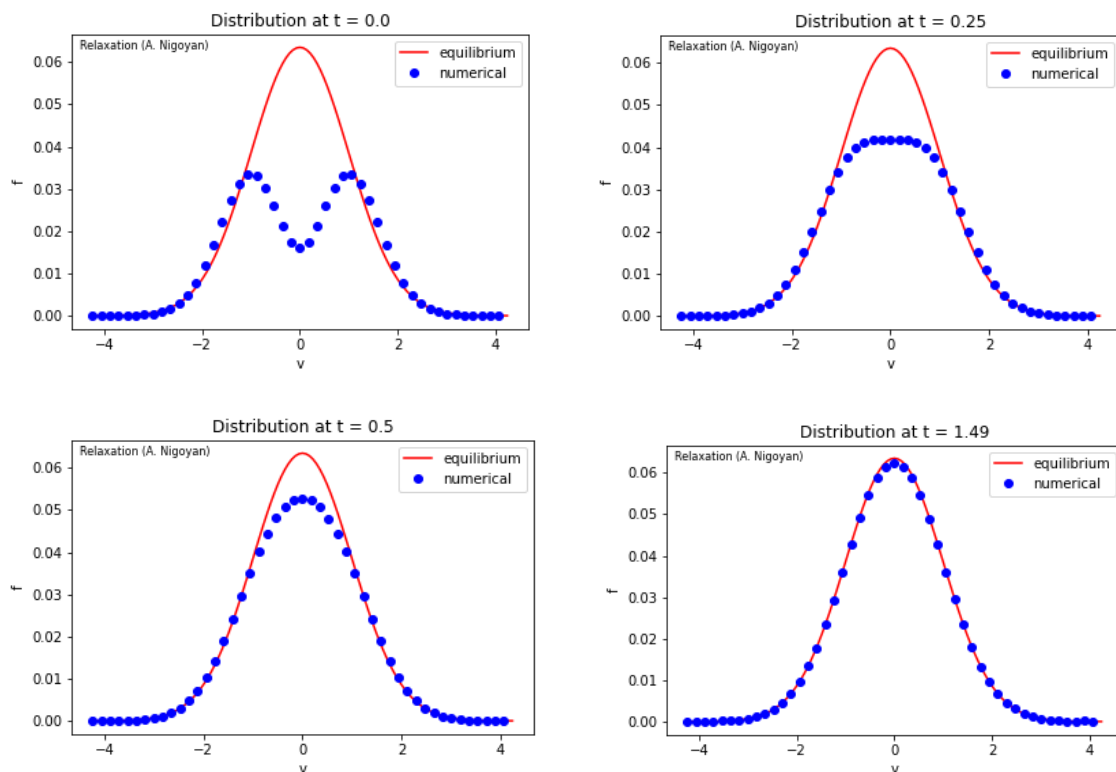


Рис. 1. Релаксация функции распределения неравновесного газа, состоящего из двух компонент, движущихся с одинаковыми скоростями в противоположные стороны

## Литература

1. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967.
2. Коробов Н. М. Тригонометрические суммы и их приложения. — М.: Наука, 1989.
3. Cheremisin F. G. A conservative method for calculation of the Boltzmann collision integral // Dokl. Phys. 1997. V. 42(11). P. 607–610.
4. Tcheremissine F. G. Solution to the Boltzmann kinetic equation for high-speed flows // Comput. Math. Math. Phys. 2006. V. 46(2). P. 315–329.

УДК 533.922

### Стратегические ориентиры ядерной энергетики в новой реальности

*В. Ф. Цибульский*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)  
НИЦ «Курчатовский институт»

Еще несколько лет назад общие представления о перспективах энергетической политики в мире выглядели оптимистично и разговоры о дефиците энергоресурсов рассматривались лишь в контексте отдаленного будущего. Наибольшую озабоченность вызывали климатические проблемы, которые напрямую увязывали с эмиссией парниковых газов, а эмиссию парниковых газов — со сжиганием ископаемого топлива. По этому поводу началась активная пропаганда в направлении «зеленой энергетики», предполагающая отказ от ископаемого топлива и замены его использованием солнечной энергии, энергии ветра и гидроэнергии там, где еще сохранилась такая возможность. В отличие от очарованного ожидания зеленого мира, развитие атомной энергетики прогнозировалось в скромном масштабе, главным образом по причине опасности, связанной с радиоактивным загрязнением значительных территорий, в результате тяжелых аварий на объектах атомной отрасли. С учетом этих нюансов образ будущего энергетического сектора экономики выглядел вполне респектабельно и оптимистично.

Обострившиеся геополитические проблемы выявили неустойчивость энергетического рынка и обозначили ряд направлений его трансформации. Пока надежды с обретением былой стабильности соотносят преимущественно с развитием возобновляемых источников энергии. Однако, принимая во внимание масштаб энергетических потребностей, необходимость соблюдения устойчивости энергоснабжения, экологические ограничения не без оснований следует полагать, что это направление в недалекой перспективе приблизится к своей естественной верхней границе. Это тем более очевидно, что проявившиеся в нынешний период кризиса проблемы энергетики уже побудили возврат к восстановлению привычной энергетической конфигурации, включая угольную и атомную генерации. Пока еще нет достаточных оснований интерпретировать эти настроения так, будто они сформировали устойчивое преобладание намерений на восстановление традиционной структуры энергетики. Однако определенные выводы для будущего нынешний этап развития, несомненно, предоставит.

Ядерная энергетика, пожалуй, единственная из доступных сейчас энергетических отраслей, способная предоставить изобилие энергии при максимальном удовлетворении экологических ограничений. Сейчас она находится как бы в засаде, дожидаясь своего часа. Изменения, произошедшие в ядерных технологиях в течение последних тридцати лет, надежно гарантируют, что опасность аварий на АЭС с большим радиоактивным загрязнением территории сейчас практически сведена к нулю в результате глубокой модернизации, новых технических решений и совершенствований нормативного характера.

В то же время крупномасштабное развитие АЭ сдерживается ограниченностью природного урана. Опасения топливного дефицита, даже в отдаленной перспективе, сдерживают инвестиционную активность. Современные ресурсы природного урана оцениваются величиной порядка нескольких десятков миллионов тонн [1], а прогнозные оценки экономически приемлемого по добыче природного урана лишь в несколько раз больше. Решение этой проблемы находится на пути замыкания топливного цикла с использованием искусственных делящихся изотопов, полученных из сырьевых изотопов урана или тория прибавлением к их ядрам одного нейтрона. При захвате нейтрона эти изотопы превращаются в плутоний или делящийся уран-233. В ряде работ показано [2–4], что наилучший способ замыкания топливного цикла связан с использованием для целей воспроизводства нейтронов, полученных в результате синтеза легких ядер дейтерия и трития. Извлечение новых делящихся изотопов из облученного топлива ядерных реакторов деления будет сопровождаться высвобождением большого количества радиоактивности, небольшая доля которой неизбежно будет уходить из-под контроля и попадать в окружающую среду.

Нейтроны, полученные из термоядерных реакций, не порождают образование радиоактивных продуктов деления. И по этой причине замкнутый топливный цикл с использованием термоядерных нейтронов для производства искусственного топлива из природных сырьевых изотопов будет в радиационном смысле на несколько порядков чище по сравнению с переработкой высокоактивного ОЯТ реакторов деления.

Энергетическая структура, в которой термоядерные реакторы будут производить искусственное топливо, а реакторы деления обеспечивать производство энергии, позволяет ориентировать развитие на формирование крупномасштабного ядерного энергетического комплекса, обладающего качеством экологической приемлемости.

Практическое освоение технологии управляемого термоядерного синтеза как мощного источника термоядерных нейтронов — это рубежная задача столетия, способная привести к энергетическому изобилию и ослабить мотивацию в необходимости конфронтации за сырьевые и экологические ресурсы.

### Литература

1. *Grancea L.* [et al.]. Uranium 2020: resources, production and demand. NEA No. 7551.— NEA, OECD, 2020.
2. *Велихов Е. П., Ковальчук М. В., Ильгисонис В. И., Иенатьев В. В., Андрианова Е. А., Цибульский В. Ф.* Эволюционное развитие атомной энергетики в направлении крупномасштабной ядерной энергетической системы с реакторами деления и синтеза // Энергетическая политика. Вып. 3. 2017. С. 12–20.
3. *Велихов Е. П., Гольцев А. О., Давиденко В. Д., Ельшин А. В., Ковалишин А. А., Родионова Е. В., Цибульский В. Ф.* Приемлемость замыкания топливного цикла ядерной энергетики // ВАНТ. Сер.: Термоядерный синтез. 2021. Т. 44. Вып. 1. С. 5–12.
4. *Велихов Е. П., Давиденко В. Д., Цибульский В. Ф.* Ядерная энергетика XXI века в контексте климатических ограничений // Международная экономика. 2021. Т. 18. № 7. С. 496–505.

УДК 533.922

### Технико-экономический анализ применения жидкосолевых реакторных систем для замыкания ядерного топливного цикла по минорным актинидам, накопленным при переработке ОЯТ ВВЭР-1000

*Л. А. Кормилицына, Т. А. Сазыкина, А. В. Сакмаров*

НИИ «Курчатовский институт»

Российский и зарубежный парк энергоблоков ВВЭР-1000/1200 насчитывает более 30 функционирующих энергоблоков, в перспективе планируется сооружение в России и различных странах мира более 30 новых АЭС с реакторными установками ВВЭР-1000/1200 [1, 2]. Принимая во внимание то, что целевой ориентировочный масштаб доли атомной энергетики в мировом энергобалансе в долгосрочном прогнозе составляет примерно 1/3 [3], количество коммерческих энергоблоков на тепловых нейтронах будет увеличиваться. Однако если в основу развития ядерной энергетики (ЯЭ) поставлены экономические интересы, то основным трендом развития мировой атомной генерации на основании анализа мировых прогнозов ввода в эксплуатацию мощностей атомной генерации является вероятная реализация пониженных мировых сценариев развития [4]. В данных условиях требования к завершающим этапам топливного цикла энергоблоков ВВЭР-1000/1200 со стороны энергосистем определяются основными трендами развития мировой атомной генерации и зависят от уровня цен на электроэнергию.

В работе проведен технико-экономический анализ суммарного снижения затрат на обращение с радиоактивными отходами (РАО) вследствие организации дожигания выделенных в процессе переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) плутония и минорных актинидов в жидкосолевом реакторе с быстрым спектром нейтронов (ЖСР-С) мощностью 1 ГВт.

Включение специализированной реакторной системы в ядерную энергетическую систему страны позволит решить задачу замыкания ядерного топливного цикла (ЯТЦ) по минорным актинидам и плутонию, накопленным при переработке ОЯТ энергоблоков ВВЭР-1000/1200.

### Литература

1. Росатом намерен построить в России 29 энергоблоков к 2045 году // Атомная энергия 2.0 [научно-деловой портал]. — URL: <https://www.atomic-energy.ru/news/2023/02/21/132987> (дата обращения 01.02.2023).
2. Сооружение АЭС за рубежом // Концепт Росэнергоатом [сайт]. — URL: [https://www.rosenergoatom.ru/stations\\_projects/perspektivy-sooruzheniya-rossiyskikh-aes-za-rubezhom/](https://www.rosenergoatom.ru/stations_projects/perspektivy-sooruzheniya-rossiyskikh-aes-za-rubezhom/) (дата обращения 01.02.2023).

3. Цибульский В. Ф. Ядерная энергетическая система в контексте развития мировой энергетики // Открытый семинар «Экономические проблемы отраслей топливно-энергетического комплекса». Москва, 27 сентября 2016 г. — М.: Изд-во ИИП РАН, 2016. URL: <https://ecfor.ru/wp-content/uploads/2017/03/171-yadernaya-energeticheskaya-sistema.pdf> (дата обращения 18.03.2023).
4. Annual Energy Outlook 2023. U.S. // Energy Information Administration #AEO2017. — URL: <https://www.eia.gov/outlooks/aeo/> (дата обращения 18.03.2023).

УДК 519.876.5

## Исследование разделения изотопов $^{20}\text{Ne}$ и $^{22}\text{Ne}$ при истечении естественного неона через тонкую щель в вакуум

С. С. Ситников<sup>1,3</sup>, Ф. Г. Черемисин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup> Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»

<sup>3</sup> НИЦ «Курчатовский институт»

Проблема разделения газовых смесей имеет большое значение в науке и технике [1]. В настоящей работе рассматривается процесс разделения двух изотопов неона  $^{20}\text{Ne}$  и  $^{22}\text{Ne}$  с близкими атомными массами. Данная задача, с одной стороны, является актуальной, имеет фундаментальное и прикладное значение [2], и с другой, довольно сложна ввиду близких физических свойств указанных изотопов. В нашей работе процесс разделения исследуется в свободной струе разреженной газовой смеси изотопов неона  $^{20}\text{Ne}$  и  $^{22}\text{Ne}$  при ее истечении из сосуда в вакуум через тонкую щель. Начальная концентрация компонентов в смеси соответствует содержанию изотопов в природном неоне (90,48%  $^{20}\text{Ne}$  и 9,25%  $^{22}\text{Ne}$ ).

Ранее авторами было проведено исследование двумерного истечения аргон-неоновой газовой смеси через тонкую щель в вакуум в работах [3, 4], где было показано, что выходной поток компонентов газовой смеси существенно зависит от их молекулярных масс. В указанных работах также было обнаружено, что в процессе формирования течения образуются нестационарные области сильного разделения компонентов газовой смеси. В данной работе аналогичная задача рассматривается для разделения изотопов неона.

Для моделирования течения реальных газов обычно используют метод прямого статистического моделирования или различные подходы, основанные на решении модельных уравнений. Оба подхода имеют известные ограничения по применимости и точности моделирования [5]. Проблема разделения компонентов газовой смеси с близкими молекулярными массами является сложной задачей. При отношении масс, близком к единице, эффект разделения сравнительно мал. В данной работе для получения наиболее точного результата и минимизации величины погрешности вычислений моделирование выполняется на основе прямого решения кинетического уравнения Больцмана [6]. Для этого применяется метод расщепления по физическим процессам [7]. При решении уравнения адвекции используется метод расщепления по пространственным направлениям [8]. При решении задачи релаксации вычисление интеграла столкновений осуществляется консервативным проекционным методом [9] с использованием сеток Коробова.

Схема постановки задачи приведена на рис. 1.

Газовая смесь, состоящая из изотопов неона  $^{20}\text{Ne}$  и  $^{22}\text{Ne}$ , находится в большом сосуде. Начальная концентрация компонентов в смеси соответствует содержанию изотопов в природном неоне,  $n_1 = 0,9275$ ,  $n_2 = 0,90725$ ,  $n_1 + n_2 = 1$ . Здесь и далее мы подразумеваем, что переменные с индексом 1 относятся к  $^{22}\text{Ne}$ , а с индексом 2 — к  $^{20}\text{Ne}$ . Все физические величины приводятся в безразмерном виде. Атомные массы компонентов газовой смеси равны  $m_1 = 1$ ,  $m_2 = 0,909$ . Изначально газ находится в термодинамическом равновесии. Начальные температуры компонентов газовой смеси равны  $T_1 = T_2 = 1$ . Задача двумерна в физическом пространстве с симметрией вдоль прямой, проведенной от середины щели. Благодаря симметрии расчеты выполняются только в верхней полуплоскости области счета. На линии симметрии задаются зеркальные условия. На стенках сосуда ставятся диффузные граничные условия, а на границах области вакуума — условие нулевого потока молекул в расчетную область.

Моделирование проводилось в диапазоне значений числа Кнудсена от 0,2 до 5. Использовался неравномерный шаг по пространству. В области щели шаг по пространству составлял менее 0,2 длины свободного пробега молекул и увеличивался по мере удаления от щели. Шаг по импульсу был равен 0,25 безразмерного импульса, по времени — менее  $5 \cdot 10^{-3}$  времени свободного пробега. В качестве потенциа-

ла взаимодействия молекул был взят потенциал твердых сфер. Для различных значений числа Кнудсена были получены распределения коэффициента разделения изотопов неона

$$\alpha = \alpha(x, y) = \frac{n_{\text{Ne-20}}(x, y)}{n_{\text{Ne-22}}(x, y)} \bigg/ \frac{n_{\text{Ne-20}}^0}{n_{\text{Ne-22}}^0} - 1,$$

где  $n(x, y)$  — концентрация,  $n^0$  — начальная концентрация соответствующего изотопа. Распределение коэффициента разделения для  $\text{Kn} = 1$  в различные моменты времени приведено на рис. 2.

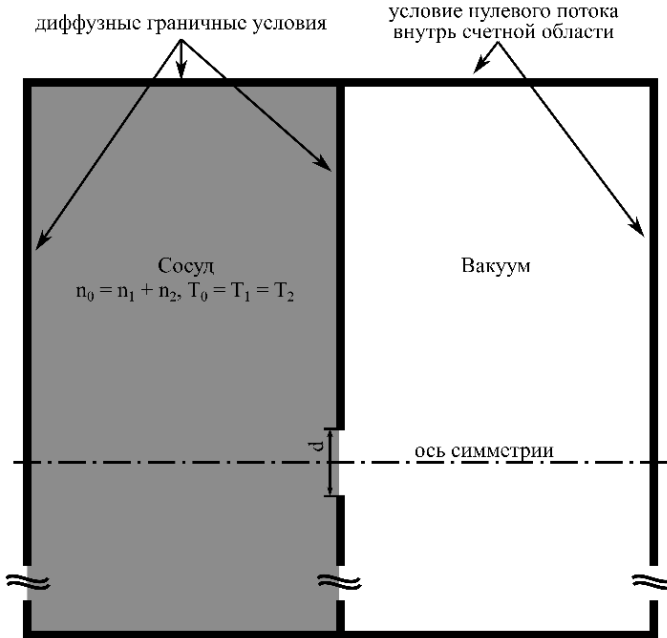


Рис. 1. Постановка задачи

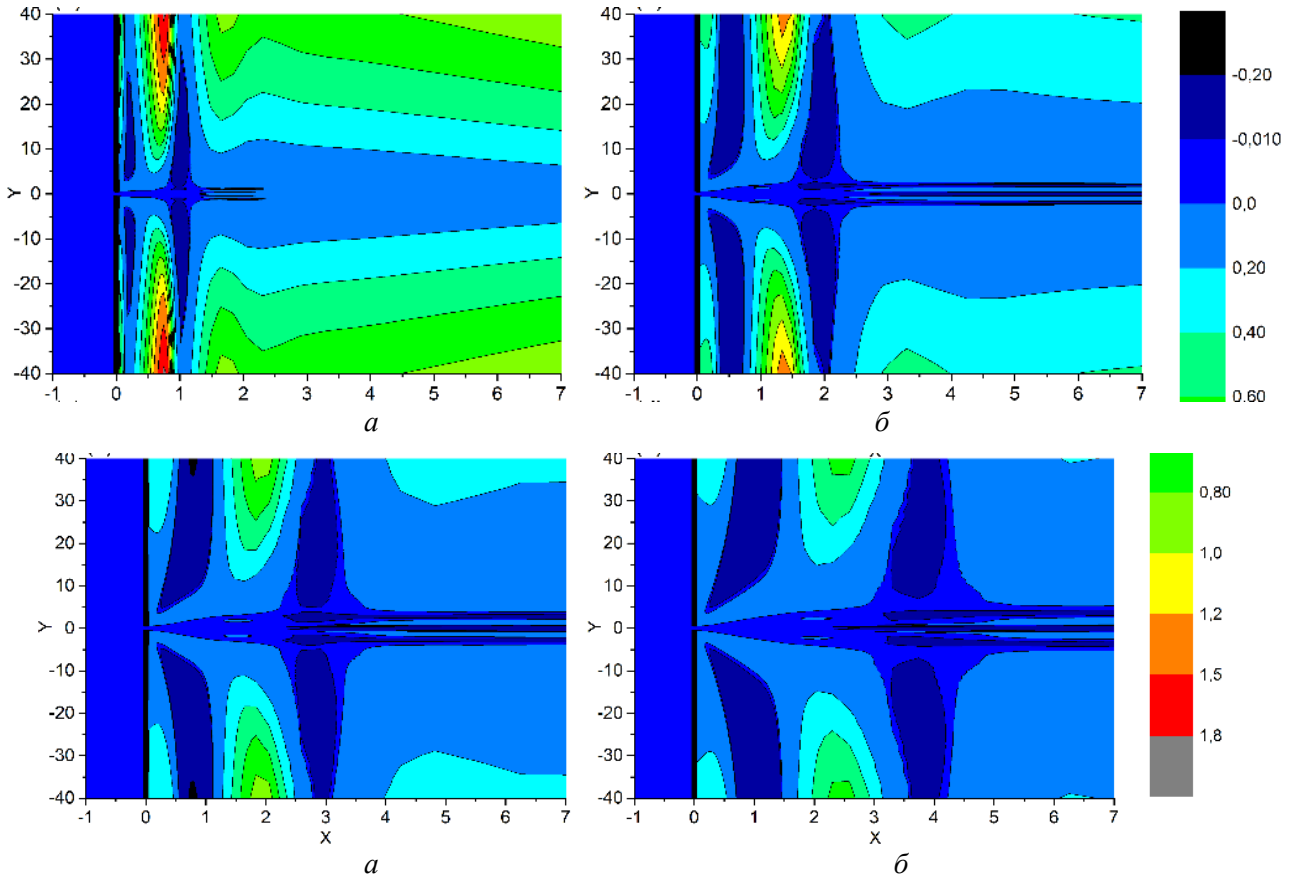




Рис. 2. Коэффициент разделения изотопов  $\alpha$ :  $a$  —  $t=4$ ;  $b$  —  $t=8$ ;  $c$  —  $t=12$ ;  $d$  —  $t=16$

Максимальное значение коэффициента разделения вблизи щели было достигнуто при  $Kn = 0,2$  и составило 1,8. Таким образом, в областях сильного разделения компонентов смеси было зафиксировано увеличение начального отношения концентраций изотопов в 2,8 раз. Полученные в данной работе результаты могут иметь приложения в задаче разделения газовых смесей.

### Литература

1. *Sabouri M., Darbandi M.* Numerical study of species separation in rarefied gas mixture flow through micronozzles using DSMC // *Phys. Fluids*. 2019. V. 31(4): 042004. DOI: 10.1063/1.5083807.
2. *Bondarenko V. L., Simonenko Yu. M., Diachenko O. V., Matveyev E. V.* Cascade units for neon isotope production by rectification // *Low Temp. Phys.* 2013. V. 39(5). P. 482–486. DOI: 10.1063/1.4807148.
3. *Ситников С. С., Черемисин Ф. Г., Сазыкина Т. А.* Моделирование начальной стадии истечения двухкомпонентной разреженной газовой смеси через тонкую щель в вакуум // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2021. Т. 13. № 4. С. 749–759. DOI: 10.20537/2076-7633-2021-13-4-747-759.
4. *Sitnikov S. S., Tcheremissine F. G.* Simulation of mixture components separation in a rarefied argon-neon jet on the basis of direct solution of the Boltzmann kinetic equation // *J. Comput. Sci.* 2021. V. 55: 101467. DOI: 10.1016/j.jocs.2021.101467.
5. *Sharipov F., Seleznev V.* Data on internal rarefied gas flows // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 1998. V. 27(3). P. 657–706. DOI: 10.1063/1.556019.
6. *Коган М. Н.* Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967.
7. *Аристов В. В., Черемисин Ф. Г.* Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана // *Докл. АН СССР*. 1976. Т. 231. № 1. С. 49–52.
8. *Самарский А. А., Вабищевич П. Н.* Аддитивные схемы для задач математической физики. — М.: Наука, 2001.
9. *Додулад О. И., Кюсс Ю. Ю., Потапов А. П., Черемисин Ф. Г., Шувалов П. В.* Моделирование течений разреженного газа на основе решения кинетического уравнения Больцмана консервативным проекционным методом // *Ж. вычисл. матем. и матем. физики*. 2016. Т. 56. № 6. С. 89–105. DOI: 10.7868/S0044466916060119.

УДК 533.922

### **Количественные оценки образования газообразных продуктов радиолиза в упаковке высокоактивных радиоактивных отходов для моделирования процессов диффузии газов в конструкционные материалы для целей прогнозирования долговременных прочностных и коррозионных свойств упаковок**

*А. А. Бабайлов, Л. А. Кормилицына, А. В. Нахапетян, Д. В. Щербаков*

НИЦ «Курчатовский институт»

Проведен анализ образования в упаковке радиоактивных отходов газообразных продуктов радиолиза с проникновением водорода в конструкционный материал упаковки, потенциально приводящий к ухудшению прочностных свойств контейнера и снижению обоснованного срока безопасного хранения, а также возникновению избыточного давления, потенциально способного привести к деформации упаковки, нарушению герметичности и выходу радионуклидов в окружающую среду.

Требованиями НП-093-14 [1] установлено, что газообразование в РАО вследствие коррозии, радиолиза, биохимического разрушения органических веществ, входящих в состав РАО, а также иных радиохимических, химических и биологических процессов не должно приводить к возникновению избыточного давления в упаковке РАО, приводящего к ее деформации и нарушению целостности и выходу радионуклидов в окружающую среду свыше пределов, установленных в соответствии с федеральными нормами и правилами в области использования атомной энергии.

Оценка изменения давления внутри контейнера невозвратного для захоронения РАО класс 2 проведена на период 1 000 лет — срока сохранения изолирующей способности упаковки для радиоактивных отходов класса 2, установленного критериями приемлемости радиоактивных отходов для захоронения в соответствии с [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант 20-07-00135.

## Литература

1. Федеральные нормы и правила в области использования атомной энергии «Критерии приемлемости радиоактивных отходов для захоронения» (НП-093-14)/утв. Приказом Ростехнадзора от 15.12.2014 г. № 572.

УДК 54.061

### Численное моделирование состояний тепловой системы в процессе синтеза монокристаллов фторидов в форме стержней и трубок методом ГНК

*В. А. Юсим<sup>1,2</sup>, С. Э. Саркисов<sup>2</sup>, Ю. Ю. Клосс<sup>1,2</sup>, Ю. В. Широковская<sup>1</sup>, Д. А. Бабайлов<sup>1</sup>, С. М. Голуб<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский институт»

Целью настоящей работы являлось сравнение значений состояния тепловой системы в процессе синтеза монокристаллов в форме стержней, трубок методом горизонтально направленной кристаллизации (ГНК), полученных при перемещении исследуемого ростового тигля относительно его начального положения в кристаллизационной установке.

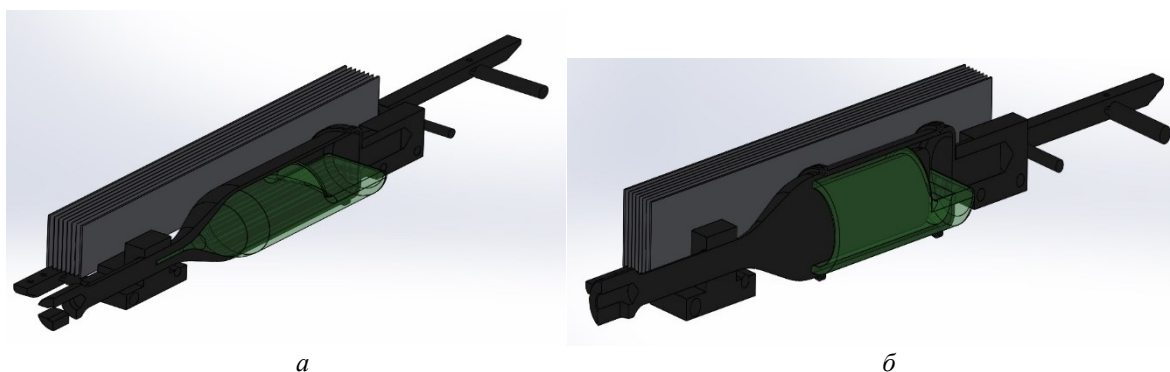


Рис. 1. Графитовые тигли-контейнеры для синтеза монокристаллов в виде стержней (а) и виде трубок (б), помещенные на графитовую волокушу

Известно, что метод ГНК позволяет выращивать не только монокристаллы в форме объемных пластин прямоугольного сечения, но и в виде профилированных тел вращения — стержней, трубок [1]. В качестве расчетных моделей авторами были разработаны два типа ростовых тиглей-контейнеров для синтеза монокристаллов фторидов в форме стержней и трубок (рис. 1). Полноразмерные модели данных тиглей помещались в кристаллизационную установку «Рубитек-1» с углеграфитовым тепловым узлом (УГТУ) [3, 4]. В качестве объекта исследования использовался монокристалл со структурой флюорита  $\text{CaF}_2$ .

Анализ состояний тепловой системы в определенный момент времени проводился путем горизонтального перемещения в сочетании с вращением вокруг оси графитового тигля с монокристаллом внутри ростового узла (относительно нагревателей, диафрагм) с шагом 2 мм с позиции начала кристаллизации до позиции конца кристаллизации [1–3]. При этом учитывался объем уменьшения расплава в тигле по мере образования монокристалла во время каждого смещения. Так, длина выращиваемого кристалла  $L$  зависела от ширины зоны расплава  $l_p$ , высоты расплава  $h_p$ . Зная начальную длину зоны расплава  $l_n$  и степень загрузки контейнера с шихтой  $K_{ш}$ , определялась длина синтезируемого монокристалла при изменении высоты расплава на величину  $\Delta h_p$ , связанную с изменением угла кругового сегмента при вращении тигля с монокристаллом вокруг своей оси на  $\Delta\phi$ . Максимальная длина монокристалла от начала  $l_k = 0$  до конца синтеза (использование почти всей шихты) определялась по формуле [1]:

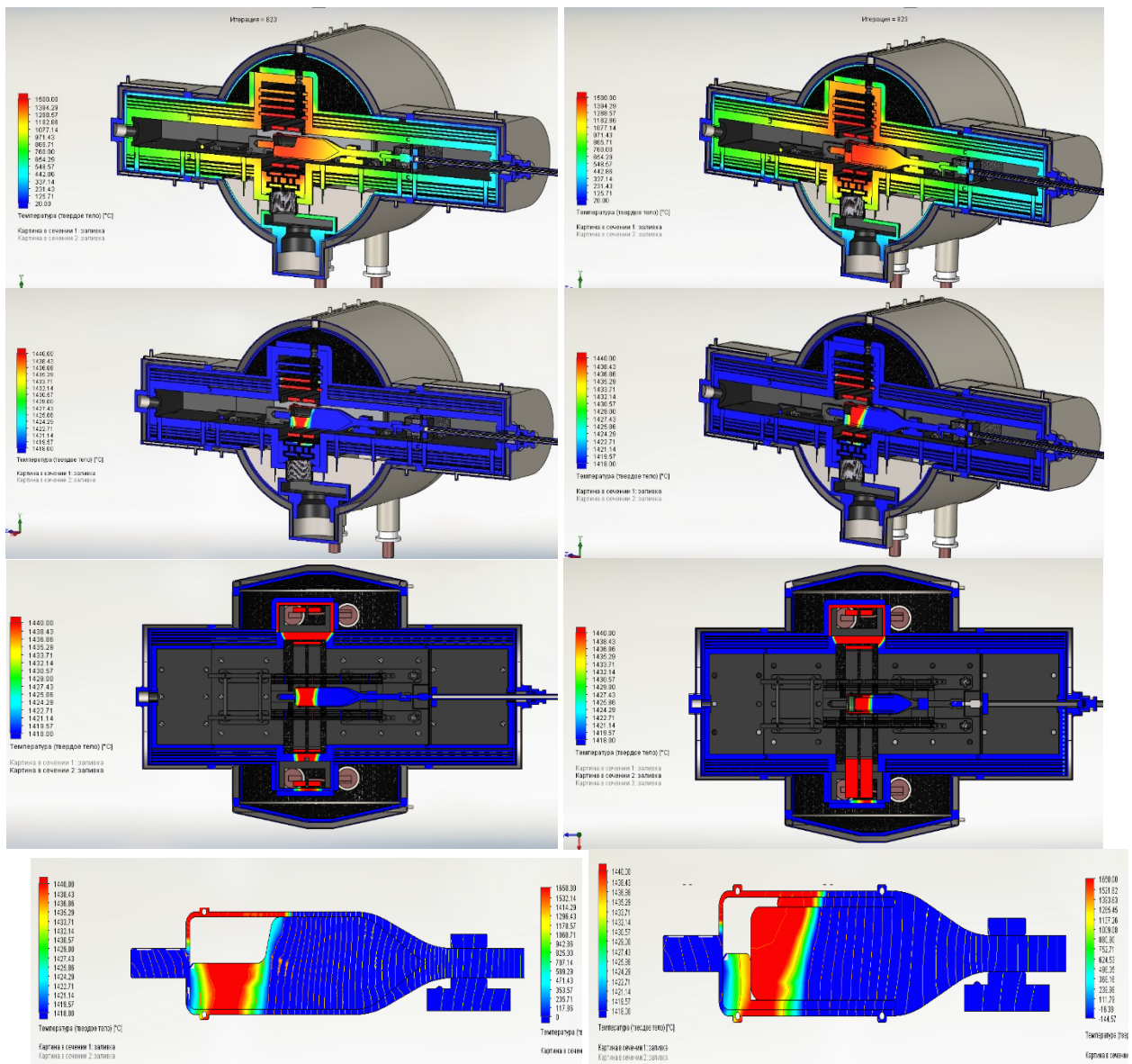
$$L = l_k(1 - K_{ш})K_3. \quad (1)$$

Авторами 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  $\text{CaF}_2$ ) 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.

Выполненные исследования позволили определить температурные распределения в тепловой системе для каждого смещения исследуемых графитовых тиглей с монокристаллом относительно ростового узла с нагревателями. Получены представления процессов тепло- и массопереноса в модели УГТУ, а также необходимые данные о влиянии температурных полей на форму фронта кристаллизации. Представленная картина прогрева тиглей с монокристаллом для каждого из смещений показала влияние формы тигля по мере перемещения на температурное изменение и величину энтропии плавления, которое в числе прочих термодинамических параметров определяет кинетику и морфологические особенности растущих кристаллов, связанных с гранным ростом кристаллов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 20-08-00278 А) и НИЦ «Курчатовский институт» (приказ НИЦ «Курчатовский институт» от 18.08.2022 г. № 2174).



*a*

*б*

Рис. 2. Результаты математического моделирования распределения температуры вдоль ростового узла кристаллизационного аппарата «Рубитек-1» с УГТУ (показана середина кристаллизации), где *a* — изотермы для тигля-контейнера позволяющего выращивать монокристаллы в виде стержней; *б* — изотермы для тигля-контейнера, позволяющего выращивать монокристаллы в виде трубок

## Литература

1. Багдасаров Х. С. Высокотемпературная кристаллизация из расплава. — М.: Физматлит, 2004.
2. Багдасаров Х. С. Горяинов Л. А. Тепло- и массоперенос при выращивании монокристаллов направленной кристаллизацией. — М.: Физматлит, 2007.
3. Yusim V. A., Sarkisov S. E., Ryabchenkov V. V., Kloss Yu. Yu., Govorun I. V., Ivanova L. V., Sakmarov A. V. Mathematical modeling of heat and mass transfer processes in the graphite thermal unit of the crystallization apparatus for Horizontal directional solidification method//J. Phys. Conf. Ser. 2020. V. 1560(1): 012060.
4. Патент № 2643980 Российская Федерация. Тепловой узел установки для выращивания галоидных кристаллов методом горизонтально направленной кристаллизации: № 2017127968; заявл. 04.08.17; опубл. 06.02.18 / В. А. Юсим, Р. К. Калимуллин, Рябченков В. В., С. Э. Саркисов; заявитель НИЦ «Курчатовский институт».

УДК 54.061

### Влияние воздействия $\gamma$ -облучения на оптические спектры редкоземельных ионов в кристаллах фторидов

С. Э. Саркисов<sup>2</sup>, В. А. Юсим<sup>1,2</sup>, В. В. Абанников<sup>1</sup>, Р. К. Калимуллин<sup>2</sup>, Д. О. Михайлов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Формирование структурных особенностей анионной подрешетки определяет природу примесных  $R^{3+}$ -центров в активированных кристаллах [1]. В смешанных кристаллах фторидов от занимаемых атомами фтора кристаллографических позиций в результате структурного разупорядочения анионной (фторидной) подрешетки [2] зависит координационное многообразие полиэдров, окружающих примесный  $R^{3+}$ -ион. Подобное разупорядочение, связанное со статистическим распределением атомов фтора по анионным вакансиям и междоузлиям, формирует кристаллическое поле [3], приводящее к неоднородному уширению линий в оптических спектрах активированных кристаллов.

Рассмотрены спектры поглощения ионов  $Nd^{3+}$  в простых и смешанных кристаллах фторидов со структурой тисонита. Найдено, что в простых кристаллах  $LaF_3:Nd^{3+}$  с упорядоченной структурой под воздействием мощного  $\gamma$ -излучения в анионной подрешетке возникает квазиразупорядочение по ионам фтора, приводящее к уширению спектральных линий ионов  $Nd^{3+}$ , которое является температурно зависимым, в отличие от неоднородно уширенных спектральных линий смешанных структурно разупорядоченных кристаллов твердых растворов  $La_{1-x}Ba_xF_{3-x}:Nd^{3+}$ . Термообработка облученных кристаллов  $LaF_3:Nd^{3+}$  снимает все виды радиационно-наведенных дефектообразований. В рамках модели увеличения частоты флуктуаций тепловой энергии объясняется возможный механизм температурного исчезновения квазиразупорядочения в кристалле  $LaF_3:Nd^{3+}$ .

Монокристаллы фторидов  $LaF_3:Nd^{3+}$  и их твердых растворов  $La_{1-x}Ba_xF_{3-x}:Nd^{3+}$  ( $x=0,05$ ) смешанных соединений системы  $LaF_3-BaF_2$  со структурой тисонита (тригональная сингония, пространственная группа  $R\bar{3}c1$ ) с концентрацией ионов  $Nd^{3+}$  до 2 мол.% выращивались методом горизонтальной направленной кристаллизации в атмосфере Ar при избыточном давлении 147 кПа, из которых были изготовлены образцы для исследований в виде пластин  $15 \times 15$  мм толщиной до 5 мм. Источником ионизирующего излучения (ИИ) являлся ГИК-7-4 (активность радионуклида  $^{60}Co$  в источнике  $\sim 2,18 \times 10^{15}$  Бк) на установке  $\gamma$ -излучения ГУТ-200 (НИЦ «Курчатовский институт»). Длительность облучения образцов ИИ до дозы 2700 Грей составляла 30 минут. Спектры поглощения снимались на спектрофотометре СФ-56.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 20-08-00278 А) и НИЦ «Курчатовский институт» (приказ НИЦ «Курчатовский институт» от 18.08.2022 г. № 2174).

## Литература

1. Каминский А. А., Саркисов С. Э. Физика и спектроскопия лазерных кристаллов. — М., Наука, 1986.
2. Сорокин Н. И., Фоминых М. В., Кривандина Е. А., Жмурова З. И., Лямина О. И., Соболев Б. П. Ионный транспорт в анион-дефицитной нестехиометрической фазе  $La_{0,95}(Ba_{1-x}Sr_x)_{0,05}F_{2,95}$  ( $0 < x < 1$ )// Физика твердого тела. 1998. Т. 40. № 4. С. 658–661.
3. Ельяшевич М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия. — М.: Едиториал УРСС, 2001.

---

## Секция фундаментальных основ многомасштабного атомистического моделирования

---

Председатель: Г. Э. Норман (д. ф.-м. н., профессор)

Зам. председателя: Н. М. Щелкачев (д. ф.-м. н., доцент)

Секретарь: И. Д. Федоров

---

Дата: 07.04.2023 и 08.04.2023

Время: 11:00

УДК 544.165

### Расчеты методом молекулярной динамики с потенциалами комбинированного метода квантовой механики/молекулярной механики для изучения ферментативных реакций

*М. Г. Хренова*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

<sup>2</sup>ФИЦ Биотехнологии РАН

В докладе будут рассмотрены теоретические основы комбинированного метода квантовой механики/молекулярной механики (КМ/ММ) для расчета энергий и сил в модельных молекулярных системах, а также метод молекулярной динамики для изучения конформационного пространства систем. Метод КМ/ММ основан на разделении молекулярной системы на две части. В наиболее важной части системы, где, например, происходит химическая реакция, применяются методы квантовой химии, при этом вся остальная система описывается с помощью классических силовых полей. Такое разделение позволяет наиболее точно описывать интересующие процессы, при этом классическое окружение вносит свой вклад за счет электростатических взаимодействий между подсистемами и стерических ограничений. Современный уровень развития молекулярного моделирования позволяет рассчитывать молекулярно-динамические траектории с потенциалами КМ/ММ. Это особенно важно для структурно гибких систем: белков или молекул в растворителе. В докладе будут приведены примеры конкретных биомолекулярных реакций, возможности и ограничения метода КМ/ММ МД. Среди примеров будут процессы, изучение которых имеет важное прикладное значение: реакции инактивации антибиотиков бактериальными бета-лактамазами, протеолиз в активном центре основной протеазы вируса SARS-CoV-2 и реакции с участием нуклеозидфосфатов.

Работа представлена в рамках гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых — докторов наук (МД-1390.2022.1.4).

УДК 538.913

### Молекулярная динамика дегидратированного двойного слоистого гидроксида алюминия и лития

*В. Г. Лукьянчук*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Объединенный институт высоких температур РАН

Гидроксид алюминия  $Al(OH)_3$  имеет множество практических применений. В частности, показано, что одна из его структурных форм — двойной слоистый гидроксид алюминия и лития (ДГАЛ-С1) — способна сорбировать ионы лития из бедных источников с высокой селективностью над другими ионами [1]. В этой связи актуальна задача поиска путей структурной модификации ДГАЛ-С1 с целью повышения его термодинамической устойчивости [2], в чем может существенно помочь метод молекулярной динамики.

Целью данной работы было получение и анализ молекулярно-динамической модели дегидратированного ДГАЛ-Сl. Анализ корректности модели проводился путем сравнения рассчитанных структурных и динамических характеристик с экспериментальными данными ДГАЛ-Сl на базе нейтронной дифракции [3] и предыдущими исследованиями методом функционала электронной плотности для диффузии ионов лития в межламельном пространстве [4]. В качестве отправной точки создания МД-модели было выбрано силовое поле ClayFF [5], зарекомендовавшее себя в области моделирования глинистых веществ. Показано, что в оригинальном виде это поле неприменимо, так как происходит стремительное разрушение рассматриваемой структуры (см. рис. 1). Тем не менее пересчет эффективных зарядов алгоритмом DDEC6 [6, 7] и отказ используемого в ClayFF от углового взаимодействия М-О-Н (где М — металлический ион Li или Al) позволил получить устойчивую во времени модель дегидратированного ДГАЛ-Сl (см. рис. 1).

В работе использовались программные пакеты Chargemol Program [8] и Quantum Espresso, в которых реализовались алгоритм DDEC6 и метод функционала электронной плотности. МД-расчеты проводились в LAMMPS в различных ансамблях с шагом 1 фс.

Для полученной модели построены парциальные радиальные функции распределения для пар атомов Al–O, Li–O, O–O, а также рассчитаны равновесные профили плотности частиц в направлении нормали к ламели и средние по времени параметры элементарной ячейки. Все результаты соотносятся с экспериментальными данными положений атомов в элементарной ячейке. Проведен анализ выхода модели на равновесие при использовании различных термодинамических ансамблей, в результате чего был сделан вывод о неважности выбора конкретного ансамбля при анализе структурных свойств.

Также было проведено моделирование диффузии межламельного лития в двух ансамблях NPT и NVE, в ходе чего был вычислен его коэффициент двумерной диффузии при 300 К, равный  $D = 0,2 \text{ \AA}^2/\text{пс}$  и соотносящийся с данными, полученными методом квантовой молекулярной динамики. Сравнение NPT- и NVE-ансамблей позволило сделать вывод о не критичном влиянии баростата на диффузионные свойства межламельного пространства.

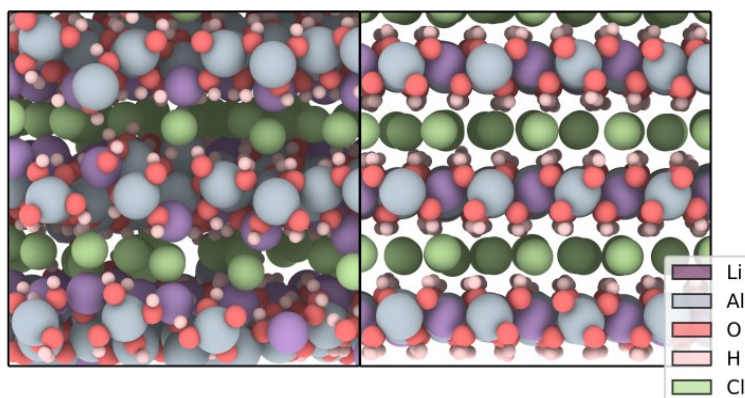


Рис. 1. Графическое сравнение модели ClayFF (слева) и модели, полученной в данной работе (справа), при 300 К после 1 нс расчета. Затемнение цвета соответствует удалению от наблюдателя. Видно, что структура слева существенно менее упорядочена, что не соответствует экспериментальным данным

Исследование выполнено в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075–02-2021–1316 от 30.09.2021) при поддержке Российского научного фонда по гранту № 18-19-00734. Автор выражает благодарность Г. Э. Норману и А. В. Ланкину за постановку задачи и продуктивные обсуждения.

## Литература

1. Paranthaman M. P., Li L., Luo J. [et al.]. Recovery of lithium from geothermal brine with lithium–aluminum layered double hydroxide chloride sorbents // *Environ. Sci. Technol.* 2017. V. 51. P. 13481–13486.
2. Wu L., Li L., Evans S. F. [et al.]. Lithium aluminum-layered double hydroxide chlorides LDH: Formation enthalpies and energetics for lithium ion capture // *J. Am. Ceram. Soc.* 2018. V. 102. P. 2398–2404.
3. Besserguenev A. V., Fogg A. M., Francis R. J. [et al.]. Synthesis and structure of the gibbsite intercalation compounds  $[\text{LiAl}_2(\text{OH})_6]\text{X}$  {X = Cl, Br,  $\text{NO}_3$ } and  $[\text{LiAl}_2(\text{OH})_6]\text{Cl}\cdot\text{H}_2\text{O}$  using synchrotron X-ray and neutron powder diffraction // *Chem. Mater.* 1997. V. 9. P. 241–247.
4. Zhang Y., Cheng X., Wu C., Köhler J., Deng S. Electronic Structure and Lithium Diffusion in  $\text{LiAl}_2(\text{OH})_6\text{Cl}$  Studied by First Principle Calculations // *Molecules.* 2019. V. 24: 2667.
5. 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. V. 108. P. 1255–1266.

6. *Manz T. A., Limas N. G.* Introducing DDEC<sub>6</sub> atomic population analysis: part 1. Charge partitioning theory and methodology // RSC Adv. 2016. V. 6. P. 47771–47801.
7. *Limas N. G., Manz T. A.* Introducing DDEC<sub>6</sub> atomic population analysis: part 2. Computed results for a wide range of periodic and nonperiodic materials // RSC Adv. 2016. V. 6. P. 45727–45747.
8. *Manz T. A., Sholl D. S.* Improved atoms-in-molecule charge partitioning functional for simultaneously reproducing the electrostatic potential and chemical states in periodic and nonperiodic materials // J. Chem. Theory Comput. 2012. V. 8. P. 2844–2867.

УДК 577.322.4

## Применение метода динамического сетевого анализа в исследовании механизма фоторегуляции фотоактивируемых аденилатциклаз

*М. С. Курышкина, А. М. Кулакова, А. В. Немухин*

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Оптогенетические системы на основе фоторецепторов — инструменты тонкого контроля клеточных процессов. Системы на основе фотоактивируемых аденилатциклаз (РАС) позволяют контролировать концентрацию циклического аденозинмонофосфата (сАМР), являющегося аллостерическим эффектором протеинкиназ и ионных каналов [1]. РАС катализируют реакцию превращения аденозинтрифосфата (АТР) в сАМР. В зависимости от продуцента белка меняются физико-химические и каталитические параметры фермента. РАС бактерий из *Beggiatoa* (bРАС) и *Oscillatoria acuminata* (ОаРАС) благодаря малым размерам и низкой активности в невозбужденном состоянии представляют собой особый интерес в качестве фоторецептора оптогенетических систем. Однако если в случае bРАС повышение скорости ферментативной реакции при фотовозбуждении возрастает на два порядка и не зависит от времени возбуждения, то для ОаРАС скорость возрастает на один порядок и зависит от времени возбуждения [2]. Целью данной работы являлся сравнительный анализ путей фоторегуляции bРАС и ОаРАС методами молекулярной динамики и последующего динамического сетевого анализа.

Для получения полноатомных моделей ферментов bРАС и ОаРАС в невозбужденном(D)/возбужденном(L) состояниях из банка данных Protein Data Bank были выбраны структуры с PDB ID 5MBV/5MBD и 4YUS/5X4T соответственно. bРАС и ОаРАС — гомодимеры, мономеры (А и В) которых состоят из фоторецепторного (BLUF) и каталитического (АС) доменов и перемычки. Хромофором BLUF домена является флавиномононуклеотид (FMN). На основе полноатомных моделей структурно подобно комплексу АТР и АС из *Arthrospira platensis* (PDB ID: 1WC5) были получены фермент-субстратные комплексы АТР-bРАС и АТР-ОаРАС. Для данных систем была проведена молекулярная динамика (МД) с использованием программного пакета NAMD. Все расчеты проводились в ансамбле NPT ( $p=1$  атм,  $T=298$  К). Для белков использовалось силовое поле CHARMM36, для FMN — CGenFF, молекул воды — TIP3P. Шаг интегрирования составил 1 фс, продолжительность траекторий — 200 нс.

Для анализа молекулярно-динамических траекторий был применен динамический сетевой анализ. Данный анализ проводился с помощью соответствующего плагина NetworkView в программе VMD. В рамках данного анализа все тяжелые атомы системы за исключением молекул воды и противоионов были разбиты на определенные структурные фрагменты, формирующие вершины графа, которые соединялись ребрами с определенным весом, если атомы соответствующих фрагментов находились на расстоянии менее 4 Å на протяжении 75% молекулярно-динамической траектории. Для каждой системы из соответствующих графов, были определены кратчайшие пути между вершинами, относящимся к FMN и связанным с ним аминокислотным остаткам, и вершин, относящихся к АТР и окружающим его аминокислотным остаткам. Оптимальным путем считается путь из ребер, сумма весов которых наименьшая. Для полного описания системы, наряду с оптимальным путем, были получены и проанализированы субоптимальные пути.

По результатам данного анализа были определены следующие ключевые для фоторегуляции аминокислотные остатки: bРАС — Q49, Y7, L75, T72, H120, K125, N265, R278; ОаРАС — Q48, Y6, L74, D72, R120, K124, Y125, Y265, R278. Несмотря на различия, можно выделить следующие консервативные участки пути фоторегуляции: Q49 → Y7 → L75 → K125 → K264 → D274 → D274 → R278. Однако стоит отметить большее количество субоптимальных путей, соответствующих bРАС. Таким образом, больший синергитический эффект конформационных изменений для данной системы при фоторегуляции может являться причиной более значительного повышения скорости реакции при фотовозбуждении.

## Литература

1. *Stierl M.* [et al.]. Light modulation of cellular cAMP by a small bacterial photoactivated adenylyl cyclase, bPAC, of the soil bacterium *Beggiatoa*// *J. Biol. Chem.* 2011. V. 286. P. 1181–1188.
2. *Ohki M.* [et al.]. Structural insight into photoactivation of an adenylate cyclase from a photosynthetic cyanobacterium// *PNSD.* 2016. V. 113. P. 6659–6664.

УДК 538.931

### Исследование бинарных смесей углеводов методом потенциала средней силы

*Б. И. Никитюк<sup>1,2</sup>, В. В. Писарев<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

В работе изучается применимость метода потенциала средней силы для получения свойств двухфазных бинарных систем углеводов.

Фазовое равновесие двухфазных систем и смесей определяется соотношением свободных энергий частиц жидкости и газа компонентов [1]. Для определения этих энергий обычно используются статистические методы, которые часто являются вычислительно затратными, такие как термодинамическое интегрирование или пертурбация свободной энергии. Альтернативным способом получения свободной энергии частиц системы является метод потенциала средней силы (ПСС), в котором профиль свободной энергии системы получается как интеграл силы, действующей на частицу в процессе перехода между состояниями, усредненной по ансамблю

$$F_{1 \rightarrow 2} = \int_{r_1}^{r_2} \langle F \rangle dr,$$

где  $F_{1 \rightarrow 2}$  — изменение энергии Гельмгольца при переходе между состояниями,  $\langle F \rangle$  — сила, усредненная по ансамблю,  $r$  — обобщенная координата.

В данной работе рассматривается применение метода ПСС для расчета свойств смесей, таких как свободная энергия сольватации, растворимость и константы Генри.

Исследование ведется методом молекулярной динамики (МД) с помощью пакета LAMMPS [2] в потенциале обобщенного атома Trape-UA [3]. Использование метода МД позволяет получить усреднение по силы ансамблю за счет усреднения по траектории расчета или из стационарных свойств, таких как функции радиального распределения в компонентах [4].

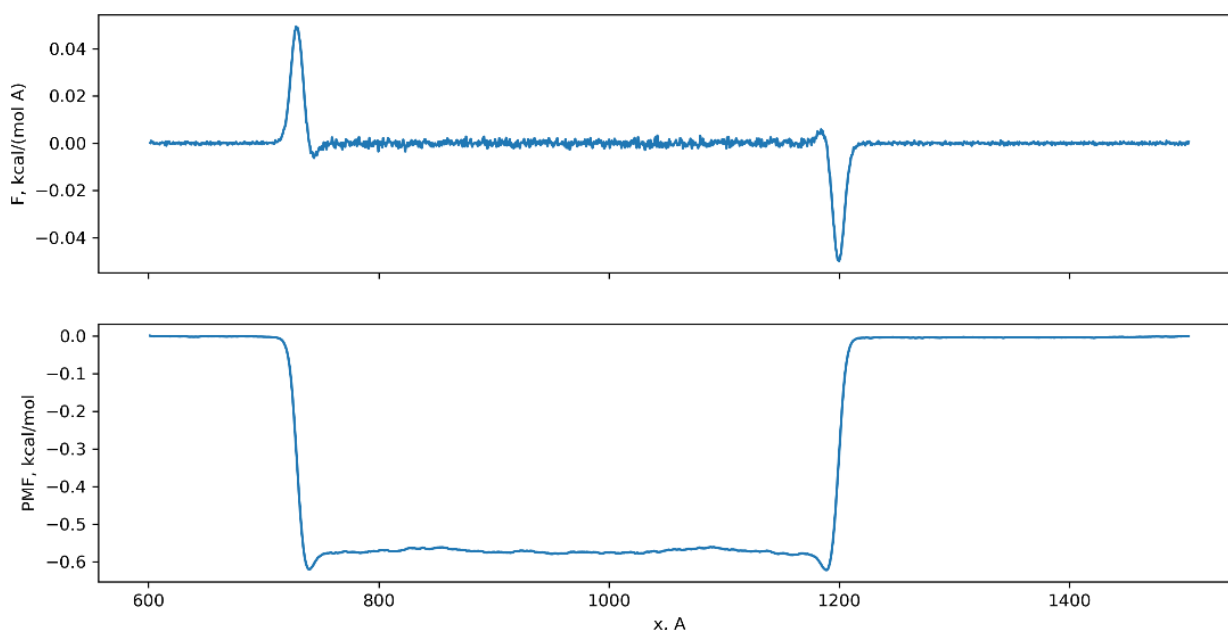


Рис. 1. Зависимость средней силы и интеграла средней силы от координаты для метана в смеси с этаном



На рис. 1 представлена полученная зависимость усредненной силы и ее интеграла от абсолютной координаты в системе для молекулы метана в двухфазной смеси с этаном.

### Литература

1. *Tuckerman M.E.* Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation. — New York: Oxford University Press, 2010.
2. *Plimpton S.* Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *J. Comp. Phys.* 1995. V. 117(1). P. 1–19.
3. *Martin M. G., Siepmann J. I.* Transferable potentials for phase equilibria. 1. United-atom description of n-alkanes // *J. Phys. Chem. B.* 1998. V. 102. P. 2569–2577.
4. *Trzesniak D., Kunz A.-P. E., van Gunsteren W. F.* A comparison of methods to compute the potential of mean force // *Chem. Phys. Chem.* 2007. V. 8(1). P. 162–169.

УДК 539

### Природа перехода между аморфными льдами низкой и высокой плотности: молекулярно-динамическое моделирование процесса зарождения новой фазы

*А. А. Шуплецова<sup>1,2</sup>, В. В. Стегайлов<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Две различные формы аморфного льда  $H_2O$  уже давно привлекают интерес в научном сообществе. Особенно интересны их взаимные превращения, индуцированные давлением, которые во многом напоминают фазовый переход первого рода. Несмотря на то, что эти фазы не являются термодинамически устойчивыми, существует множество как теоретических, так и экспериментальных доказательств, подтверждающих эту гипотезу. В частности, скачок плотности и гистерезис проявляются во многих исследованиях. Но такая характерная особенность переходов первого рода, как нуклеация, ранее мало обсуждалась в литературе. Предполагается, что «зародыши новой фазы» в таких превращениях слишком малы, чтобы экспериментально наблюдать их образование [1].

В данной работе мы рассматриваем превращения между аморфными льдами низкой и высокой плотности, индуцированные давлением, в рамках метода классической молекулярной динамики для модели воды TIP4P/Ice [2]. Предложен алгоритм классификации локальной структуры, по которому можно выявить кластеры одного аморфного льда внутри другого, что позволяет увидеть процесс образования и роста кластеров новой фазы в процессе взаимных превращений, а также визуально оценить размер «критических зародышей» [3]. Кроме того, в докладе будет описана попытка исследовать поведение плоской границы раздела двух аморфных фаз при различных условиях.

### Литература

1. *Tonauer C. M., Seidl-Nigsch M., Loerting T.* High-density amorphous ice: Nucleation of nanosized low-density amorphous ice // *J. Phys. Condens. Matter.* 2017. V. 30(3): 034002.
2. *Abascal J. L., Sanz E.* [et al.]. A potential model for the study of ices and amorphous water: TIP4P/Ice // *J. Chem. Phys.* 2005. V. 122(23): 234511.
3. *Garkul A., Stegailov V.* Molecular dynamics analysis of elastic properties and new phase formation during amorphous ices transformations // *Sci. Rep.* 2022. V. 12(1): 13325.

## Генерация сольватов CL-20 с помощью генератора случайных структур с фиксированным окружением

Я. В. Пропад<sup>1</sup>, И. А. Круглов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова

Разработка высокоэнергетических материалов является приоритетной и важной во многих сферах. Одним из способов улучшения критических свойств энергетических материалов является сокристаллизация [1]. Наиболее широкоизученным высокоэнергетическим соединением, имеющим самую высокую плотность энергии, является гексанитрогексаазаизовюрцитан (CL-20, с типичными полиморфами  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ - и  $\epsilon$ -). Обширные расчетные работы [2, 3] показали, что включение небольших гостевых молекул улучшает характеристики детонации (теплота детонации, давление детонации, скорость детонации и т. д.) исходного вещества CL-20.

Данная работа посвящена поиску стабильных сольватов CL-20 · N<sub>2</sub>O и CL-20 · CO<sub>2</sub>. Генерация сольватов производится на основе экспериментальных дегидратированных ячеек  $\alpha$ -CL-20 с использованием генератора случайных структур с фиксированным окружением. Принцип работы генератора представлен на рис. 1.

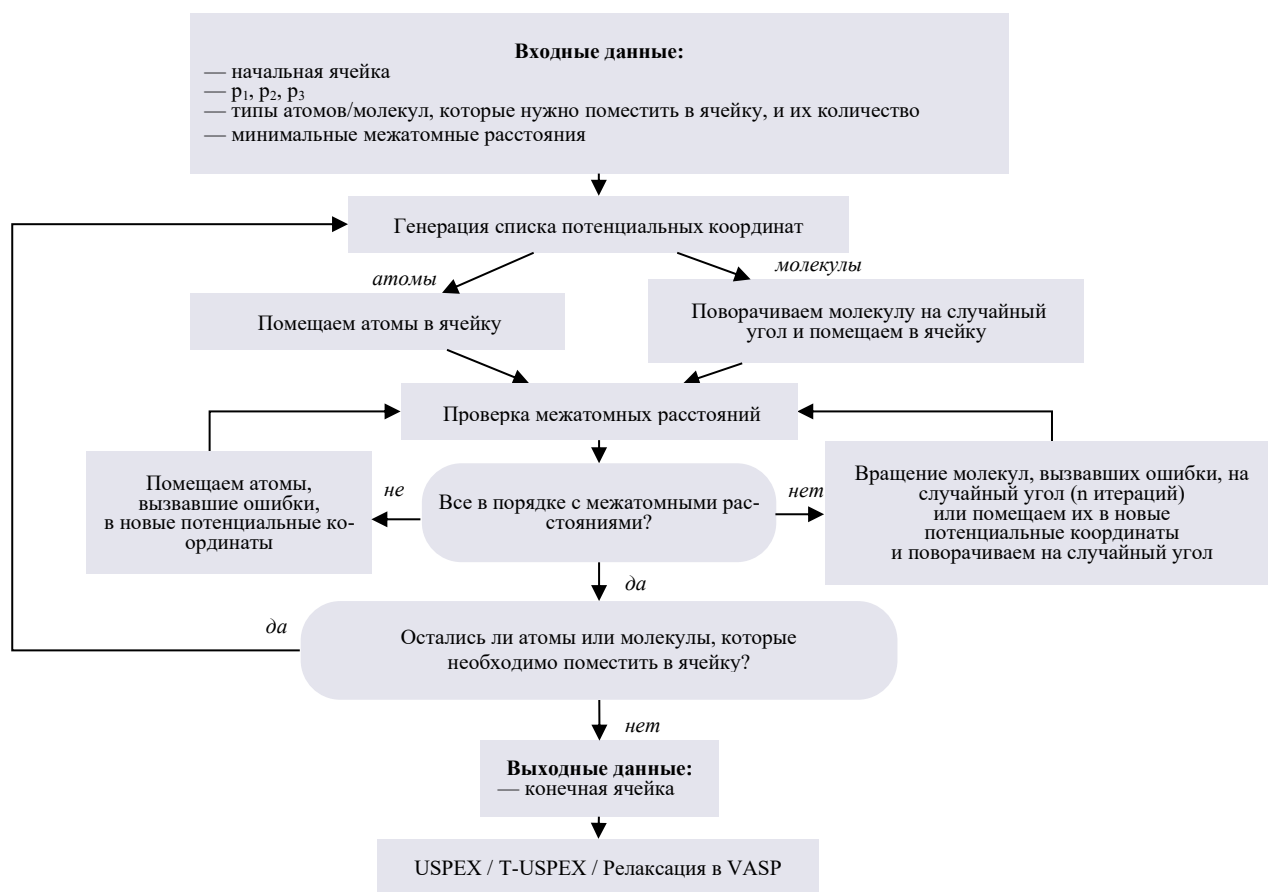


Рис. 1. Схема алгоритма генератора случайных кристаллических структур с фиксированными позициями некоторых структурных элементов

Настройки минимальных межатомных и межмолекулярных расстояний позволяют поместить молекулы N<sub>2</sub>O или CO<sub>2</sub> между молекулами CL-20 в окрестностях позиций Вайкоффа молекул H<sub>2</sub>O в дегидратированной ячейке с поворотом на случайный угол относительно геометрического центра молекулы. Далее осуществлялась релаксация кристаллических структур с использованием потенциала межатомного взаимодействия ReaxFF, реализованного в пакете LAMMPS. Ниже на рис. 2 представлен пример поиска стабильной структуры CL-20 · CO<sub>2</sub>.



Рис. 2. Поиск стабильной структуры сольвата CL-20 · CO<sub>2</sub>: применение генератора случайных структур к фиксированному окружению исходной ячейки и релаксация полученной структуры в потенциале ReaxFF при стандартных условиях

Полученные в ходе релаксации структуры с пространственной группой соотносятся с экспериментальными данными [4]. Также в ходе работы производился анализ структурного разнообразия полученных в ходе генерации случайных кристаллических структур.

### Литература

1. Pakhnova M., Kruglov I., Yanilkin A., Oganov A. R. Search for stable cocrystals of energetic materials using the evolutionary algorithm USPEX // Phys. Chem. Chem. Phys. 2020. V. 22(29). P. 16822–16830.
2. Pu L., Xu J. J., Liu X. F., Sun J. Investigation on the thermal expansion of four polymorphs of crystalline CL-20 // J. Energ. Mater. 2016. V. 34. P. 205–215.
3. Xiao Y., Chen L., Geng D., Yang K., Lu J., Wu J. A quantum-based molecular dynamics study of the ICM-102/HNO<sub>3</sub> host-guest reaction at high temperatures // Phys. Chem. Chem. Phys. 2020. V. 22. P. 27002–27012.
4. Xu J. [et al.]. Host-guest energetic materials constructed by incorporating oxidizing gas molecule into organic lattice cavity toward to high-energetic and low-sensitive performance // Chem. Comm. 2019. V. 55(7). P. 909–912.

УДК 538.931

### Сравнение энергий миграции точечных дефектов в нитриде урана, предсказываемых межатомными потенциалами ADP и EAM

*Е. А. Лобашев<sup>1,2</sup>, А. С. Антропов<sup>1,2</sup>, В. В. Стегайлов<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>3</sup>Высшая школа экономики (национальный исследовательский университет)

Нитрид урана рассматривается как возможное топливо для реакторов на быстрых нейтронах [1], но достаточно мало изучен. Его описание методом молекулярной динамики может позволить понять многие процессы и описать некоторые его свойства, но для того чтобы проводить молекулярно-динамические вычисления, необходимо найти межатомный потенциал.

При выборе межатомного потенциала необходимо учитывать, как он описывает свойства вещества, которые важны для конкретной задачи. Для многих задач важную роль играют точечные дефекты и их миграция. Чаще всего измерение энергии миграции дефекта производится методом упругой ленты (NEB) [2], но у него есть существенный недостаток: он может неправильно определить механизм миграции дефекта. Также используется другой метод, избавленный от этого недостатка, но более затратный — через МД-вычисление коэффициента диффузии дефектов. Мы определили механизмы и энергии миграции точечных дефектов в UN, предсказываемые двумя существующими потенциалами — EAM [3] и ADP [4]. Для них энергии миграции были вычислены только при помощи NEB, притом в случае ADP — только для первой версии потенциала [1]. Мы же помимо NEB использовали динамический метод. Также удалось заметить, что в этих двух потенциалах междоузельный атом урана по-разному взаимодействует с вакансиями и междоузельными атомами азота.

## Литература

1. *Kuksin A. Y., Starikov S. V., Smirnova D. E., Tseplyaev V. I.* The diffusion of point defects in uranium mononitride: Combination of DFT and atomistic simulation with novel potential // *J. Alloys Compd.* 2016. V. 658. P. 385–394.
2. *Henkelman G., Uberuaga B. P., Jónsson H.* Climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths // *J. Chem. Phys.* 2000. V. 113. P. 9901–9904.
3. *Kocevski V., Cooper M. W., Claisse A. J., Andersson D. A.* Development and application of a uranium mononitride (UN) potential: Thermomechanical properties and Xe diffusion // *J. Nucl. Mater.* 2022. V. 562: 153553.
4. *Starikov S. V., Tseplyaev V. I.* The atomistic simulation of pressure-induced phase transition in uranium mononitride // *J. Nucl. Mater.* 2016. V. 480. P. 7–14.

УДК 538.9

## Энергия и энтропия образования точечных дефектов на примере FeO

*Н. А. Фоминых<sup>1,2</sup>, В. В. Стегайлов<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

В данной работе была построена атомистическая модель, описывающая пленку оксида железа в контакте с жидким металлическим теплоносителем с растворенным Fe–O. Модель потенциала Терсоффа для Fe–O с соответствующим ускорением на графических ускорителях позволила нам рассчитать молекулярно-динамические траектории длиной 600 нс для двухфазной системы с 48000 атомами (без явного представления атомов жидкого металла).

Данные прямые МД-расчеты позволили получить аррениусовские зависимости концентраций точечных дефектов, которые можно описать в терминах энергии и энтропии образования дефектов. Эти величины были рассчитаны для одного и того же потенциала Терсоффа с использованием комбинации равновесных методов: 1) статической оптимизации энергии для получения разницы энергий дефектной и идеальной конфигурации; 2) метода вставок Видома для получения химических потенциалов железа и кислорода в растворенной фазе; 3) термодинамического интегрирования для расчета колебательной энтропии точечных дефектов.

Было показано хорошее согласие с результатами прямых молекулярно-динамических расчетов. Рассмотрены вопросы сходимости и ограничения равновесных методов. Расчеты с прототипом модели для тройной системы Fe–O–Pb показали значительное влияние жидкого металла, которое он может оказывать на химические потенциалы растворенных Fe и O. Проведенный анализ открывает путь к самосогласованному моделированию оксидных пленок в контакте с жидким теплоносителем с использованием первопринципных методов и/или сложных моделей межатомного взаимодействия.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Росатома (грант 20-21-00159).

## Литература

1. *Fominykh N. A., Nikolskiy V. P., Stegailov V. V.* Atomistic model of an oxide film in contact with a liquid metal coolant: Defects concentrations and chemical potentials of dissolved Fe–O // *Comput. Mater. Sci.* 2023. V. 220: 112061.

УДК 577.38

## Изучение коммуникации биомолекул с использованием теории информации

*Р. А. Маллаев, А. А. Полянский*

Институт биоорганической химии им. акад. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН,

Лаборатория моделирования биомолекулярных систем

Аллостерическая коммуникация является важным внутренним механизмом биомолекулярных систем, регулирующим взаимодействие белков в клеточной среде. Связывание эффектора в аллостерическом сайте приводит к конформационным изменениям белка, благодаря которым происходит изменение

его функциональной активности. Изучение аллостерии имеет фундаментальное значение и помогает в понимании болезней, разработке лекарств и описании физиологической передачи сигналов клетками [1].

В настоящее время существует множество экспериментальных и вычислительных методов изучения аллостерии. Из экспериментальных методов следует отметить ЯМР как мощный инструмент исследования конформационной динамики биомолекул и связанных аллостерических эффектов. Разрабатываются также теоретические модели аллостерической коммуникации, основанные на анализе пространственной структуры белков и/или данных молекулярной динамики (МД) [2].

Мы предлагаем универсальный теоретико-информационный подход исследования аллостерии, реализованный в виде написанного на Python/C++ пакета программ. В основе метода лежит анализ матрицы взаимной информации для всех пар остатков внутри белка, полученной по данным МД при помощи пакета программ PARENT [3].

Сначала получают конформационные ансамбли в ходе расчета молекулярной динамики (МД). Расчеты проводятся во внутренних координатах (связи, углы, двугранные углы), чтобы избежать лишних корреляций в декартовых координатах, связанных с поступательными движениями. По данным МД рассчитываются распределения для каждой внутренней степени свободы, а также для каждой пары степеней свобод, что позволяет получить значения энтропии и взаимной информации. Взаимная информация двух систем  $X$  и  $Y$  считается по формуле [4]

$$I(X; Y) = \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p(x, y) \log \left( \frac{p(x, y)}{p(x)p(y)} \right).$$

Методом иерархической кластеризации (аминокислотные остатки молекулы являются «близко-расположенными», если их взаимная информация превосходит некоторое пороговое значение) молекула разбивается на кластеры, представляющие собой обособленные с точки зрения взаимной информации домены, и проводится анализ обмена информацией между полученными кластерами. Для известного активного сайта осуществляется поиск потенциального аллостерического сайта — участка молекулы, наиболее связанного с активным центром с точки зрения взаимной информации. Максимизируя функционал

$$\frac{I(A; X) \cdot I(X; B)}{H(X)} \rightarrow \max, \text{ где } H(X) = - \sum_{x \in X} p(x) \log(p(x)) \text{ — энтропия Шеннона,}$$

находим участок молекулы  $X$ , который вносит наибольший вклад в обмен информацией между участками  $A$  и  $B$  молекулы. Это эквивалентно тому, что минимизируются потери информации в канале с шумом, где  $A$  является источником,  $B$  — приемником, а  $X$  — перехватчиком [5]. Исследуя матрицу взаимной информации, возможно определить сильно связанные участки молекулы, а также найти наиболее подвижные и активные участки молекулы, рассматривая их значения энтропии Шеннона.

Проведена апробация подхода на глюкокиназе человека (PDB ID: 1V4S) с использованием данных микросекундных МД расчетов ( $8 \cdot 10^4$  атомов,  $5 \cdot 10^8$  шагов по времени). В частности, выявленный в белке аллостерический сайт включает ряд остатков, установленных ранее экспериментально [6].

Таким образом, был разработан и реализован метод анализа молекулярной коммуникации с использованием данных МД и теории информации. Отличительной особенностью данного алгоритма является то, что априори не делается никаких предположений о специфической структуре молекулы и о природе самой коммуникации, что позволяет применять данный метод для исследования неупорядоченных и неструктурированных систем.

## Литература

1. *Verkhivker G.M., Agajanian S., Hu G.* [et al.]. Allosteric regulation at the crossroads of new technologies: multiscale modeling, networks, and machine learning // *Front. Mol. Biosci.* 2020. V. 7: 136.
2. *Liu J., Nussinov R.* Allosteric: An overview of its history, concepts, methods, and applications // *PLoS Comput. Biol.* 2016. V. 12(6): e1004966.
3. *Fleck M., Polyansky A.A., Zagrovic B.* PARENT: a parallel software suite for the calculation of configurational entropy in biomolecular systems // *J. Chem. Theory Comput.* 2016. V. 12(4). P. 2055–2065.
4. *Cover T.M., Thomas J.A.* Elements of Information Theory. Ch. 2: Entropy, relative entropy, and mutual information. — Hoboken: Wiley, 2005. P. 13–55.
5. *Shannon C.E.* A mathematical theory of communication // *Bell System Technical Journal.* 1948. V. 27(3). P. 379–423.
6. *Kamata K., Mitsuya M., Nishimura T.* [et al.]. Structural basis for allosteric regulation of the monomeric allosteric enzyme human glucokinase // *Structure.* 2004. V. 12(3). P. 429–438.

## Оптимизация параметров модели разрушения керамик путем моделирования распространения ударных волн в веществе в соответствии с экспериментом

С. А. Дьячков<sup>1</sup>, И. А. Шукин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время алгоритмы машинного обучения и методы численной оптимизации применяются во многих сферах науки и техники. Один из наиболее частых сценариев использования — это автоматический подбор параметров универсальной приближенной модели; причем такой набор параметров, который гарантирует работу модели с наперед заданной точностью. Глобально для точного моделирования чего бы то ни было необходимо иметь: качественную математическую модель процесса, достаточно точную численную модель и алгоритм подбора гиперпараметров.

В частности, в физике высоких энергий задача описания процессов распространения ударных волн точно решается с помощью методов механики сплошных сред (математических и численных). Однако отклик материалов существенно зависит от параметров модели. Именно поэтому поднимается вопрос автоматического подбора гиперпараметров модели.

В данной работе предлагается возможный подход к решению поставленного вопроса на примере задачи подбора параметров модели распространения ударных волн в керамиках: SiC[1], BC[2] и AlN[1]. Данный подход может быть применим практически без изменений и в других областях знаний, где стоит задача подбора параметров сложной функции (в самом общем смысле) по некоторому условию.

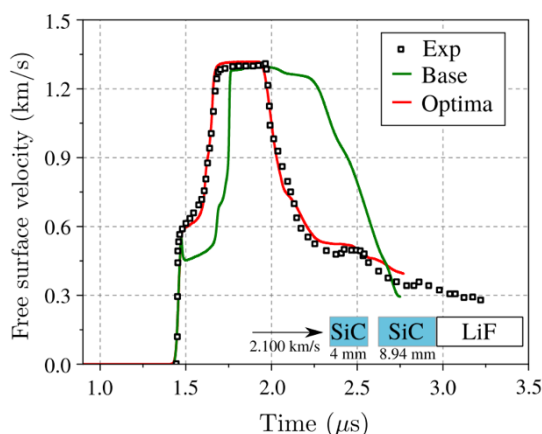


Рис. 1. Пример профилей скорости. Красный профиль — ожидаемый от модели при оптимальном наборе параметров; зеленый профиль — профиль, полученный вручную (ручным подбором параметров подбором)

### Литература

1. Grady D. E., Moody R. L. Shock compression profiles in ceramics. Sandia National Laboratories Reports, 1996. No. SAND96-0551.
2. Vogler T., Reinhart W., Chhabildas L. Dynamic behavior of boron carbide//J. Appl. Phys. 2004. V. 95(8). P. 4173–4183.

## Моделирование двойного электрического слоя на границе раствора карбоксицеллюлозы

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. Простейшую мембрану можно описать как структуру, разделяющую систему на две фазы. Из этого вытекают физико-химические свойства,

важные при изучении и использовании мембран, а именно: разность химических потенциалов ионов в мембране и в растворе (отношение концентраций), подвижность ионов в мембране, а также кинетика перехода (скорость перехода между фазами). В особенности важно изучение свойств ионов  $\text{Li}^+$ , так как они входят в состав аккумуляторов [1] и других систем. Также мембраны используются при его добыче. Важнейшей величиной, характеризующей двухфазные системы, является профиль свободной энергии, так как он дает возможность исследовать равновесие растворов. Из-за симметрии системы в работе исследуется потенциал средних сил — профиль свободной энергии вдоль выбранной оси.

Объектом исследования в данной работе является двойной электрический слой на границе двух растворов. Исследуемая ячейка состоит из ионов карбоксилцеллюлозы (2–), воды и ионов  $\text{Li}^+$  и  $\text{Cl}^-$  (рис. 1). Система имеет размеры (50×50×200) Å и разделена на 2 области, с помощью двух селективных стенок, не пропускающих ионы карбоксилцеллюлозы на основе потенциала Ленарда-Джонса. Моделировалось (~41) ионов оксидцеллюлозы, (~18800) молекул воды, (~76) иона  $\text{Li}^+$  и (~20) ионов  $\text{Cl}^-$ . Для описания потенциала межатомного взаимодействия был выбран Optimized Potentials for Liquid Simulations All-Atom (OPLS-AA), который хорошо подходит для описания водных растворов [2]. Для воды использовалась модель SPCE [3]. Константы и заряды для ионов были взяты из [4]. С помощью веб-сервиса для генерирования органических молекул LigParGen [5], была получена топология молекулы оксидцеллюлозы, а также необходимые параметры силового поля. Для молекулярного моделирования использовался программный пакет LAMMPS с шагом интегрирования 1 фс.

Вначале система выходила на равновесие в микроканоническом ансамбле NPT с заданными температурой (300 K) и давлением (1 атм). Равновесие определялось несколькими способами. Выход на равновесную константу кинетической и потенциальной энергий. Равенство средних кинетических энергий всех типов атомов с учетом их степеней свободы, так как в модели используется вода с жесткими связями. Платообразный вид профиля плотности для каждого из компонентов системы в отдалении от границы раздела.

С помощью метода зонтичной выборки [6] с последующим применением метода взвешенных гистограмм был рассчитан профиль потенциала средних сил на границе двухфазной системы. На его основе была вычислена разность химических потенциалов между растворами. С помощью ряда Фурье было решено уравнение Пуассона для данной системы, получен профиль электростатического потенциала и значения равновесных концентраций.

Расчеты проводились на кластерах МФТИ и лаборатории многомасштабного моделирования в физике мягкой материи.

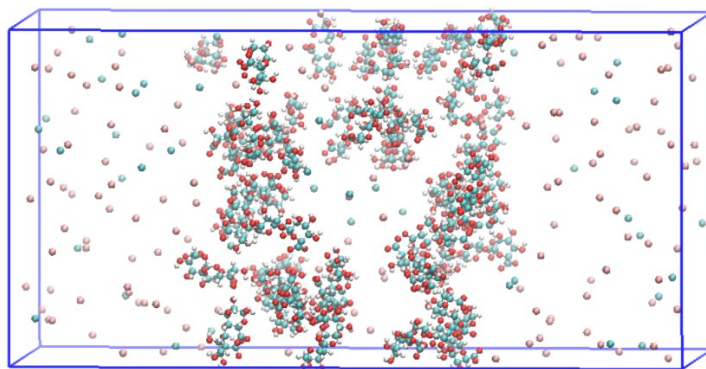


Рис. 1. Исследуемая ячейка двухфазной системы: оксидцеллюлоза и ионный раствор. Молекулы воды не показаны

Данная работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075–02–2021–1316 от 30.09.2021).

Автор благодарит А. В. Ланкина за постановку задачи и научное руководство, а также Н. Д. Кондрачука и Г. Э. Нормана за техническую помощь и обсуждения.

### Литература

1. Liu G., Zhao Z., Ghahreman A. Novel approaches for lithium extraction from salt-lake brines: A review // *Hydrometallurgy*. 2019. V. 187. P. 81–100.
2. 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. P. 11225–11236.
3. Kadaoluwa Pathirannahalage S.P. [et al.]. Systematic comparison of the structural and dynamic properties of commonly used water models for molecular dynamics simulations // *J. Chem. Inf. Model.* 2021. V. 61(9). P. 4521–4536.

4. Chandrasekhar J. [et al.]. Energy component analysis for dilute aqueous solutions of lithium(1+), sodium(1+), fluoride(1-), and chloride(1-) ions // J. Am. Chem. Soc. 1984. V. 106(4). P. 903–910.
5. Dodda L. S. [et al.]. 1.14\*CM1A-LBCC: Localized bond-charge corrected CM1A charges for condensed-phase simulations // J. Phys. Chem. B. 2017. V. 121(15). P. 3864–3870.
6. Prue J. E. Ion pairs and complexes: Free energies, enthalpies, and entropies // J. Chem. Educ. 1969. V. 46(I). P. 12–16.

УДК 577.22

## Разработка пептидного блокатора калиевого канала EAG — прототипа нового противоопухолевого препарата

**Я. И. Заварзина<sup>1</sup>, А. А. Василевский<sup>1,2</sup>, А. О. Чузунов<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт биоорганической химии им. акад. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН

Аминокислотные последовательности потенциал-чувствительных калиевых каналов EAG ( $K_v10.1$ ) и hERG ( $K_v11.1$ ) идентичны на 40%, подчеркивая их гомологию. Роль hERG в потенциале действия в сердце хорошо известна, а функция EAG плохо изучена. При этом EAG гиперэкспрессируются во многих опухолевых тканях и служат фармакологической мишенью для разработки противоопухолевой терапии. Лиганды калиевых каналов можно разделить на поровые блокаторы и модуляторы. Первые, взаимодействуя с поровой областью канала, блокируют ионный ток. К примеру, все известные лиганды калиевых каналов из яда скорпионов, наиболее богатого природного источника таких соединений, представлены именно поровыми блокаторами [1]. Для hERG описано достаточно большое число лигандов, включая природные, а вот для EAG высокоаффинных и селективных лигандов неизвестно.

Учитывая гомологию каналов hERG и EAG и высокое сходство их пространственной структуры, мы задались целью модифицировать токсин скорпиона ВеКм-1, блокирующий hERG, так, чтобы он воздействовал на EAG. Для этого мы построили модели комплексов ВеКм-1 с hERG и EAG с помощью ансамблевого докинга, отбирая решения на основании информации о сближенности аминокислотных остатков [2]. Затем для этих комплексов мы рассчитали траектории молекулярной динамики с целью детального анализа межмолекулярных контактов блокатора с каналами и выявления факторов, препятствующих взаимодействию ВеКм-1 с EAG. В результате мы предложили точечные мутации токсина ВеКм-1, которые должны придать ему аффинность к каналу EAG. Предсказания планируется проверить в лабораторном эксперименте и использовать для разработки прототипа противоопухолевого препарата.

### Литература

1. Кузьменков А. И., Гришин Е. В., Василевский А. А. Разнообразие лигандов калиевых каналов и место токсинов скорпионов среди них // Успехи биологической химии. 2015. Т. 55. С. 289–350.
2. Tseng G. N., Sonawane K. D., Korolkova Y. V. [et al.]. Probing the outer mouth structure of the hERG channel with peptide toxin footprinting and molecular modeling // Biophys J. 2007. V. 92(10). P. 3524–3540.

УДК 538.9

## Молекулярно-динамическое рассмотрение стационарных потоков жидкости

**Д. Г. Павлов<sup>1,2</sup>, В. В. Стегайлов<sup>1,2,3</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>3</sup>НИУ «Высшая школа экономики»

На макроскопическом уровне поведение жидкостей и газов хорошо описывается уравнениями Навье–Стокса. Долгое время исследование поведения жидкостей и газов с помощью метода молекулярной динамики 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 ( $N=10^4$ ). Одним из наиболее выдающихся результатов, полученных относительно недавно, является работа [2], где была получена турбулентность для куэтовского течения.

В данной работе представлен и реализован новый метод создания стационарного потока вещества в задаче молекулярной динамики, приведены примеры его применения и реализованы методы высокопроизводительного анализа полученных с его помощью данных. Приведено обсуждение границ применимости предложенных техник.

В работе представлены результаты бенчмаркинга производительности предложенного алгоритма на различных видеокартах. Продемонстрировано, как при увеличении масштаба модели наблюдается переход к отрывному режиму течения.

## Литература

1. Rapaport D. C., Clementi E. Eddy formation in obstructed fluid flow: A molecular-dynamics study // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 57. P. 695–698.
2. Smith E. R. A molecular dynamics simulation of the turbulent Couette minimal flow unit // Phys. Fluids. 2015. V. 27(11): 115105.

УДК 537.9

## Особенности формирования и экранирования локальных магнитных моментов вблизи перехода металл–изолятор

Т. Б. Мазитов<sup>1</sup>, А. А. Катанин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН

Локализация электронов за счет эффектов корреляции (взаимодействия) приводит к образованию локальных магнитных моментов, которые имеют важное значение для объяснения наблюдаемых магнитных свойств некоторых существующих материалов и предсказания новых магнитных материалов. Локальные магнитные моменты возникают вследствие сильного межэлектронного отталкивания вблизи моттовского перехода металл–изолятор (ПМИ) [1] или могут быть вызваны хундовским обменным взаимодействием в так называемых «хундовских» металлах.

При наличии электронов проводимости (т. е. на металлической стороне ПМИ) ниже некоторой характерной температуры Кондо  $T_K$  локальные магнитные моменты экранируются. Ситуация при этом похожа на поведение магнитных примесей в металлах, но в отличие от стандартного эффекта Кондо в сильно коррелированных веществах роль магнитных примесей играют сами локальные магнитные моменты, и одни и те же электроны участвуют в формировании локальных моментов и их экранировании. Это отражает двойственную роль  $d$ -электронов.

Для определения характерных границ режимов формирования и экранирования локальных магнитных моментов, а также предшествующему последнему области зарождения квазичастиц были проведены программные расчеты. Вычисления были осуществлены с помощью метода continuous-time quantum Monte Carlo (CT-QMC), реализованного в программном пакете iQIST [2], и метода численной ренормализационной группы (NRG) — программный пакет TRIQS-NRG Ljubljana [3]. Дальнейшее исследование велось путем анализа полученных зависимостей ( $T$ ,  $U$ ,  $\nu$  — температура, взаимодействие, частота) физических величин, выводы из которых представлены на графиках ниже.

Результаты зависимости характеристических температур от силы взаимодействия при половинном заполнении объединены на итоговой фазовой диаграмме (рис. 1, *слева*). Мы используем следующие обозначения: PLM — режим предварительно сформированных локальных магнитных моментов, SCR — режим экранирования локальных моментов, FL — состояние ферми-жидкости. Температуры максимумов удельного сопротивления и появления квазичастиц как в собственной энергетической, так и в локальной спектральной функциях практически совпадают и отмечают границу квазичастичного (металлического) режима, которая обозначена QP. Линия Видома, полученная из точек перегиба зависимости сопротивления  $\ln \rho(U)$ , оказывается также близкой к этой границе.

Результаты для неполновинного электронного заполнения  $n < 1$  собраны на фазовой диаграмме (рис. 1, *справа*). Вблизи половинного заполнения температуры максимума сопротивления, определяющая границу режима PLM+H (формирование ЛММ и некогерентно-дырочный режим) несколько выше, чем

температуры минимума двойного заполнения и зарядовой сжимаемости, соответствующие началу режима экранирования (SCR). Как описано выше, экранирование локальных магнитных моментов в этом режиме аналогично их экранированию при половинном заполнении. При дальнейшем удалении от половинного заполнения температура возникновения квазичастиц приближается к границе режима экранирования SCR, что еще раз показывает, что локальные магнитные моменты в этом режиме существуют в экранированной фазе. В интервале заполнений  $0,90 < n < 0,95$  температура локального максимума сжимаемости резко меняется в сторону низких температур, что свидетельствует о делокализации носителей заряда (т. е. с температурой, что показывает различную природу фермионных квазичастиц вблизи и вдали от половинного заполнения и соответствует переходу от PLM+H к когерентно-дырочному режиму).

Таким образом, изучение локальных магнитных моментов, их режимов поведения открывает возможность для лучшего понимания сильно коррелированных структур, а также реальных материалов с ними связанных: оксидов переходных металлов, высокотемпературных купратных сверхпроводников. Данные результаты также применимы к фрустрированным решеткам и могут быть использованы для описания особенностей состояния спиновой жидкости.

Более детальное описание исследования было представлено авторами в публикациях [4, 5].

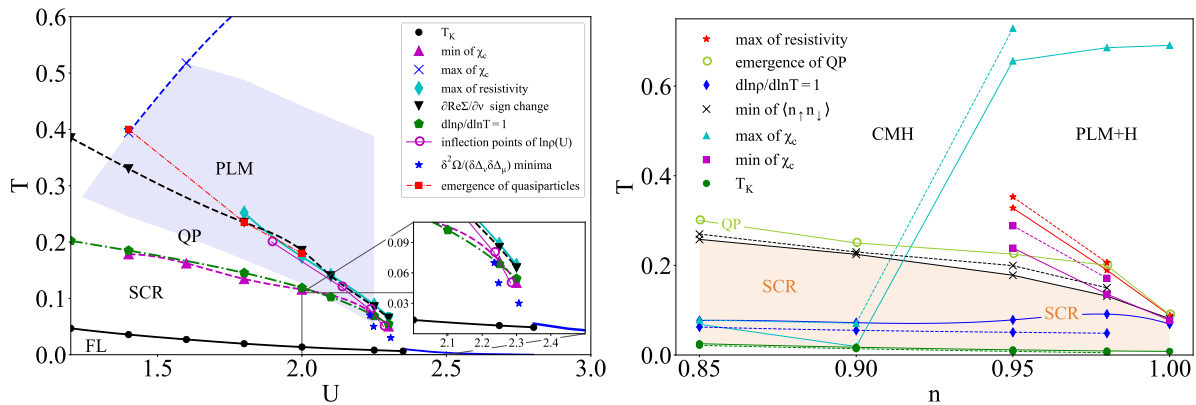


Рис. 1. Слева — фазовая диаграмма при  $n = 1$ . Бирюзовой линией (ромбы) показаны максимумы  $\rho(T)$ , зеленой штрихпунктирной линией (пятиугольники) отмечены точки, соответствующие  $\beta \equiv d \ln \rho(T) / d \ln T = 1$ , температуры появления квазичастиц, полученные по изменению знака  $\partial \text{Re} \Sigma(v) / \partial v$ , показаны черной штриховой линией (треугольники), а полученные по появлению пика спектральной функции — красной штриховой линией (квадраты). Линия Видома, определяемая по точкам перегиба  $\ln \rho(U)$ , показана фиолетовой линией (пустые круги). Зависимость от взаимодействия температуры Кондо  $T_K$  (черная линия с кругами), температур  $T_{c,\text{max}}$  и  $T_{c,\text{min}}$  максимумов и минимумов локальной зарядовой сжимаемости  $\chi_c(T)$  (синяя штриховая линия с крестиками и фиолетовая штриховая линия с треугольниками). Критическое взаимодействие  $U_{c2}$  ПМИ показано синей линией.

Справа — фазовая диаграмма при неполновинном заполнении. Сплошные линии — данные для кулоновского взаимодействия  $U = 2,25$ , пунктирные — для  $U = 2,5$ . Бирюзовой линией (треугольники) показаны максимумы  $\chi_c(T)$ , соответствующие верхней температурной границе неэкранированного ЛММ, а фиолетовой линией (квадраты) — минимумы  $\chi_c(T)$ , которые отмечают начало экранирования. Зеленая линия со светлыми кружками показывает переход в режим появления квазичастиц QP. Черными линиями с крестами показаны минимумы двойного заполнения  $\langle n \uparrow n \downarrow \rangle$ , ограничивающие режим экранирования SCR (оранжевая область для  $U = 2,25$ ); температуры Кондо показаны зелеными линиями (с кружками). Красными линиями (звездочками) показаны максимумы сопротивления  $\rho(T)$ , соответствующие переходу от некогерентного к когерентному движению квазичастиц, а синей линией (ромбы) показаны точки  $\beta \equiv d \ln \rho(T) / d \ln T = 1$ , которые отмечают появление линейной температурной зависимости затухания и удельного сопротивления квазичастиц.

## Литература

1. Mott N. F. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals // Proc. Phys. Soc. A. 1949. V. 62(7). P. 416–422.
2. Huang L. [et al.]. iQIST: An open source continuous-time quantum Monte Carlo impurity solver toolkit // Comput. Phys. Commun. 2015. V. 195. P. 140–160.
3. Parcollet O. [et al.]. TRIQS: A toolbox for research on interacting quantum systems // Comp. Phys. Comm. 2015. V. 196. P. 398–415; URL: <https://triqs.github.io/nrglpubljana interface/> (дата обращения 13.03.2023).
4. Mazitov T. B., Katanin A. A. Local magnetic moment formation and Kondo screening in the half-filled single-band Hubbard model // Phys. Rev. B. 2022. V. 105(8): L081111.
5. Mazitov T. B., Katanin A. A. Effect of local magnetic moments on spectral properties and resistivity near interaction- and doping-induced Mott transitions // Phys. Rev. B. 2022. V. 106: 205148.

## Критерии плавления в неоднородных ограниченных системах

*И. В. Аверин<sup>1,2</sup>, А. В. Тимофеев<sup>2,1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Фазовые переходы в ограниченных системах являются крайне интересным объектом для исследования, поскольку они обладают рядом уникальных свойств: динамическим сосуществованием фаз, большими флуктуациями, зависимостью свойств от размера, существенной неоднородностью. Примерами таких систем могут служить металлические нанокластеры, кластеры частиц Леннарда–Джонса, системы заряженных пылевых частиц в ловушке в плазме.

В данной работе были изучены фазовые переходы в системе частиц Леннарда–Джонса и в алюминиевом нанокластере методом молекулярной динамики. Инструментами исследования являются четыре критерия плавления: параметр Линдемана [1], параметр IDF [2], четырехточечный коррелятор [3] и К-энтропия [4].

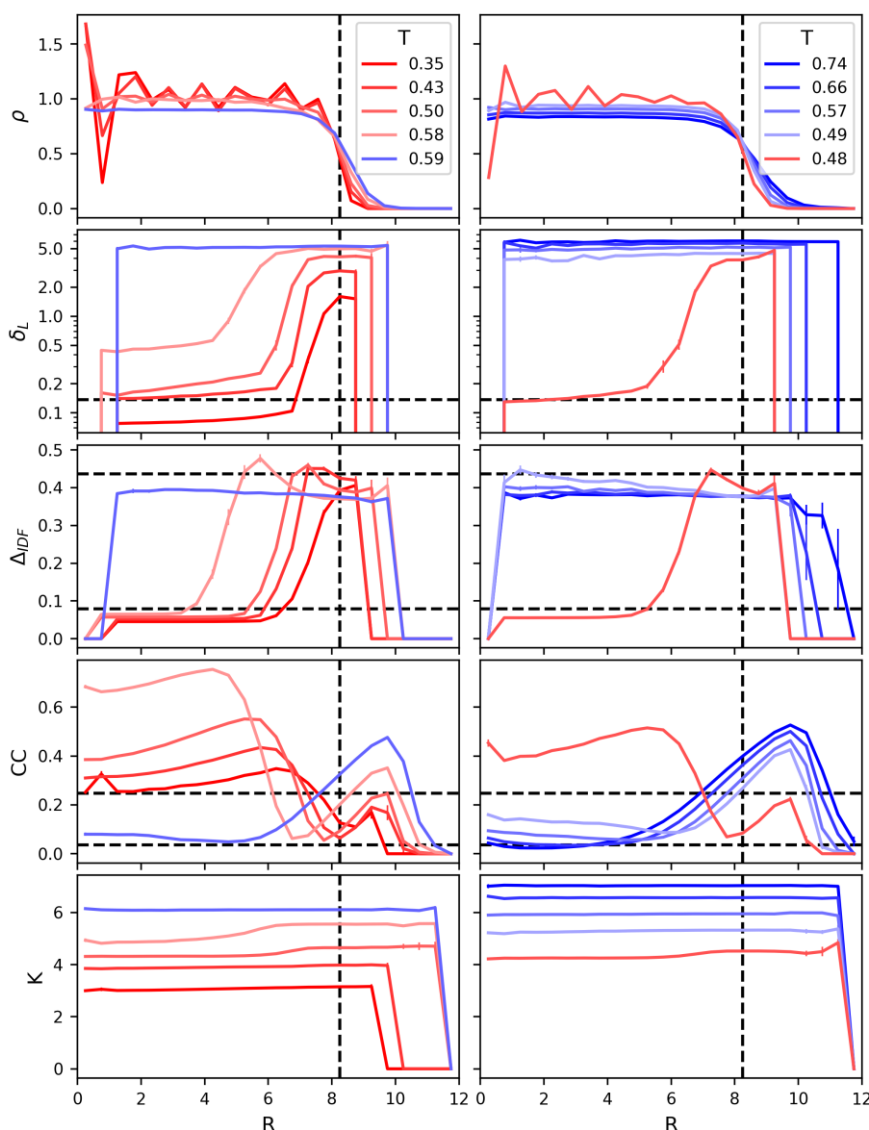


Рис. 1. Зависимости локальной плотности, параметра Линдемана, параметра IDF, четырехточечного коррелятора и К-энтропии от расстояния до центра кластера для разных температур, полученные при нагревании изначально кристаллического состояния вплоть до его плавления (слева) и при охлаждении жидкого вплоть до кристаллизации (справа). Вертикальной линией отмечен радиус кластера, горизонтальными — характерные значения, полученные в ПГУ

Были изучены их сходимости, гистерезисное поведение и применимость для изучения фазовых неоднородностей этих критериев. Получена независимость характера гистерезисного поведения всех величин от условий фазового перехода. Выделены пороговые значения величин, с помощью которых можно получать точки на кривой плавления с 5%-й точностью. Показана возможность использования значений IDF и четырехточечного коррелятора как индикаторов фазового состояния системы. На рис. 1 представлены зависимости критериев от положения частиц в кластере Леннарда–Джонса. Видна низкая эффективность К-энтропии при исследовании фазовых неоднородностей в кластере. На основе остальных величин были предложены методы оценки межфазовой границы в кластере.

Для расчета молекулярной динамики использовался программный пакет LAMMPS, вычисления производились на кластере МФТИ. Для визуализации системы применялась программа Ovito. Программы для вычисления исследуемых критериев были написаны отдельно.

### Литература

1. *Gilvarry J. J.* The Lindemann and Grüneisen laws // *Phys. Rev.* 1956. V. 102. P. 308–316.
2. *Kaelberer J. B., Eters R. D.* Phase transitions in small clusters of atoms // *J. Chem. Phys.* 1977. V. 66(7). P. 3233–3239.
3. *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. 689–693.
4. *Норман Г. Э., Стегайлов В. В.* Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // *Матем. Моделирование.* 2012. Т. 24. № 6. С. 3–44.

УДК 538.951

## О связи упругих свойств и пористости керогенов по данным атомистического моделирования

*М. С. Алексеева<sup>1</sup>, Н. Д. Кондратюк<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Исследование керогенов, основной органической составляющей сланца, представляет большой интерес как для научного сообщества, так и для нефтегазовой отрасли. Кероген, главный компонент органического вещества, имеет сложную химическую структуру. Кроме того, свойства керогена определяются его составом и процессом созревания. Экспериментально свойства керогена сложно измерить. Создание молекулярной модели керогена и расчет различных процессов способствует разработке нетрадиционных энергетических ресурсов. В последнее десятилетие появилось немало вычислительных работ в этой области, что обусловлено развитием суперкомпьютерных ресурсов.

В данной работе атомистическое моделирование керогенов проводится с использованием программного пакета молекулярной динамики GROMACS. Начальная конфигурация керогена была взята из статьи [1] путем выделения метана из конфигурации (рис. 1). Хотя атомарная структура единицы керогена неизвестна, авторами статьи [1] было предложено высокомолекулярное соединение с характерными соотношениями атомов H, C, O, P, N, S. Потенциал межатомного взаимодействия — Consistent–Valence–Force–Field (CVFF) [2].

Объемный модуль упругости определяет связь между относительным изменением объема тела и вызвавшим это изменение давлением. По определению модуль всестороннего сжатия характеризуется как

$$K = -V \frac{dP}{dV} = -V \frac{dP/d\rho}{dV/d\rho} = -V \frac{dP/d\rho}{-m/\rho^2} = \frac{V\rho^2}{m} \frac{dP}{d\rho} = \rho \frac{dP}{d\rho}.$$

Таким образом, для незрелого керогена типа IA с помощью атомистического моделирования было получено, что зависимость объемного модуля от плотности имеет вид, показанный на рис. 2.

Полученный результат хорошо согласуется с результатом для керогенов II типа из статьи [3]. С помощью метода молекулярной динамики группой из нефтяной компании Saudi Aramco рассчитаны механические свойства керогена — II типа. Авторы статьи показали, что объемный модуль, модуль Юнга, модуль сдвига растут экспоненциально с увеличением плотности, а коэффициент Пуассона — линейно.

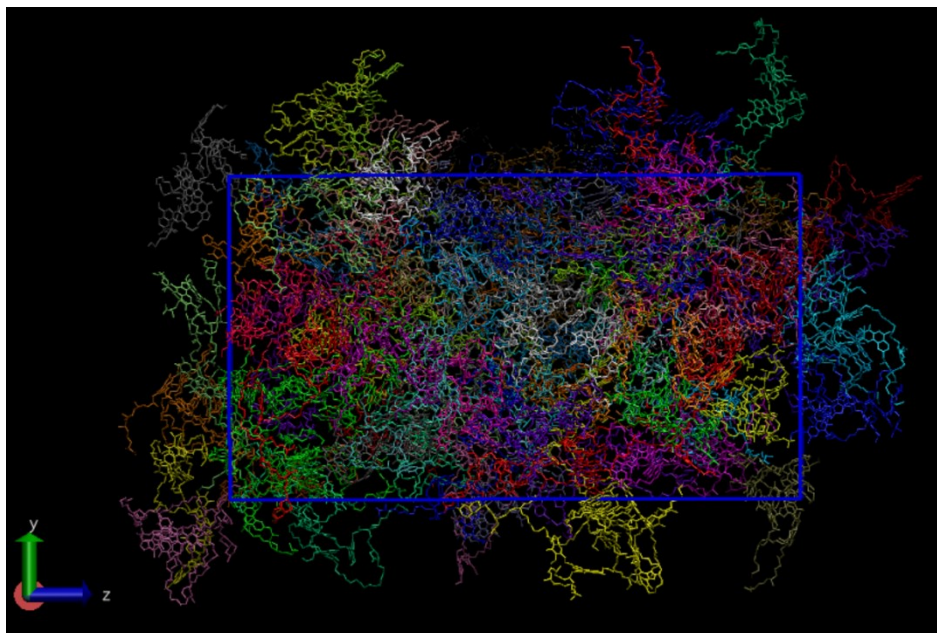


Рис. 1. Начальная конфигурация керогена типа IA, используемая для расчетов

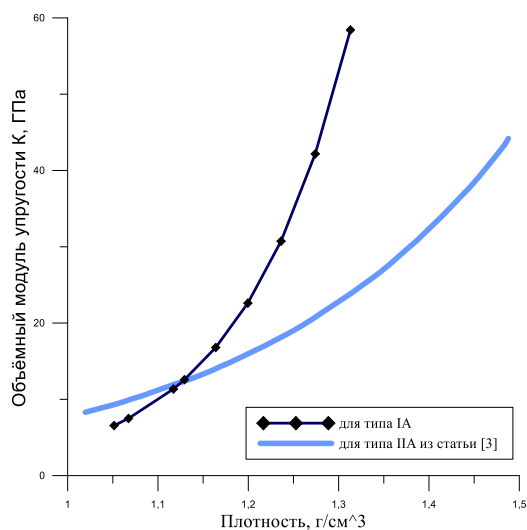


Рис. 2. Зависимость объёмного модуля  $K$  от плотности для керогена типа IA при температуре 365 К и IIА (данные статьи [3]) при температуре 0 К.

В данной работе также исследуются различные упругие свойства незрелых (IA) и перегретых (IIA) керогенов, в частности объёмный модуль упругости и модуль Юнга. Рассматривается взаимосвязь этих параметров с пористостью структуры.

Данная работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075–02–2021–1316 от 30.09.2021).

### Литература

1. *Yu et al. K. B.* Supercritical carbon dioxide enhanced natural gas recovery from kerogen micropores // *J. CO2 Util.* 2022. V. 62: 102105.
2. *Hagler T., Lifson S., Dauber P.* Consistent force field studies of intermolecular forces in hydrogen-bonded crystals. 2. A benchmark for the objective comparison of alternative force fields // *J. Am. Chem. Soc.* 1979. V. 101. 5122–5130.
3. *Kashinath A.* [et al.]. Modeling the effect of maturity on the elastic moduli of kerogen using atomistic simulations // *Proc. 7th Unconventional Resources Technology Conference (URTeC) 2019.* DOI: 10.15530/urtec-2019-1048.

## Поиск составов конструкционных материалов с повышенной длительной прочностью с помощью методов машинного обучения

А. Н. Клопов<sup>1,2</sup>, А. В. Янилкин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова

Свойства длительной прочности конструкционных материалов при повышенных температурах определяют надежность и срок эксплуатации изготавливаемых из них соединений турбинных роторов, корпусов ядерных реакторов и других установок. Из-за сложности проведения соответствующих экспериментов (длительность достигает 100 000 ч) возникает вычислительная задача исследования зависимостей, связанных с пределом длительной прочности — напряжением, при котором материал разрушается не ранее заданного времени при заданной температуре. Таким образом, в работе ставится задача построения вычислительными методами зависимости между составом материала и его пределом длительной прочности, а также предсказание составов кандидатных материалов для целевых значений: температуры 500°C, напряжения 320 МПа и времени до разрушения 3 000 ч.

Для построения модели собрана база данных на основе экспериментальных значений пределов длительной прочности для низколегированных сталей, приведенных в базе данных Metallic Material Database [1] Национального исследовательского института материаловедения (NIMS). Из соображений эвристики и полноты данных исключены из признаков часть химических элементов, а также данные о термообработке.

Для построения моделей зависимости длительной прочности от химического состава исследована возможность исключения зависимостей от температуры и длительности испытаний. Для этого исследованы используемые в настоящее время зависимости [2]:

степенная

$$\log t = m \cdot \log \sigma_{\text{дл}} + A, \quad (1)$$

экспоненциальная

$$\log t = B \cdot \sigma_{\text{дл}} + C, \quad (2)$$

$t$  — время до разрушения,  $\sigma_{\text{дл}}$  — предел длительной прочности.

Значения метрик  $\overline{R}_{m-1}^2 = 0,96$ ,  $\overline{R}_{B-1}^2 = 0,97$  показывают, что обе формулы с высокой точностью описывают связь  $\sigma_{\text{дл}}$  и  $t$ .

Исследована зависимость Аррениуса

$$\log t = \frac{L}{T} + N, \quad (3)$$

$t$  — время до разрушения,  $T$  — температура (для исследования зависимости использовались значения  $t$ , вычисленные по формуле (2) для заданного  $\sigma_{\text{дл}} = 320$  МПа).

Из значения  $\overline{R}_L^2 = 0,96$  также следует, что зависимость (3) подтверждается.

С помощью полученных зависимостей были исключены признаки  $T$  и  $t$ : с помощью зависимости (2)  $\sigma_{\text{дл}}(t)$  для фиксированного  $T = 500^\circ\text{C}$  были вычислены значения  $\sigma_{\text{дл}}$  при  $t = 3162$  ч для каждой плавки материалов.

Для поиска зависимости между значениями пределов длительной прочности и составами были использованы регрессионные модели машинного обучения: Support Vector Regressor (SVR), Random Forest Regressor (RFR), Gradient Boosting Regressor (GBR) и Extreme Gradient Boosting Regressor (XGBR). Путем кросс-валидации на обучающей выборке были подобраны гипер-параметры моделей. Полученные результаты предсказаний на тестовой (отложенной) выборке приведены на рис. 1. Метрикой точности предсказаний моделей на обеих выборках выступала формула RMSE. Ошибки моделей на обучающей и тестовой выборках:

$$\text{SVR: RMSE}_{\text{train}} = 32,1 \text{ МПа}, \quad \text{RMSE}_{\text{test}} = 35,1 \text{ МПа};$$

$$\text{RFR: RMSE}_{\text{train}} = 21,3 \text{ МПа}, \quad \text{RMSE}_{\text{test}} = 24,7 \text{ МПа};$$

$$\text{GBR: RMSE}_{\text{train}} = 24,1 \text{ МПа}, \quad \text{RMSE}_{\text{test}} = 27,4 \text{ МПа};$$

$$\text{XGBR: RMSE}_{\text{train}} = 29,3 \text{ МПа}, \quad \text{RMSE}_{\text{test}} = 34,2 \text{ МПа}.$$

Абсолютные значения ошибок приемлемы. С учетом этого относительно близкие значения ошибок на обучающей и тестовой выборках свидетельствуют о высокой обобщающей способности каждой из моделей.

Данные модели использовались для поиска составов. Поскольку модели машинного обучения не позволяют получить обратную функцию, поиск кандидатных материалов производился путем перебора составов генетическим алгоритмом, максимизирующим предсказанное значение предела длительной прочности при целевых значениях:  $T = 500^\circ\text{C}$  и  $t = 3000$  ч.

Таким образом, проверена зависимость предела длительной прочности от времени и температуры, получены предсказательные модели для поиска новых составов низколегированных материалов. В дальнейшем предполагается провести серию экспериментов по длительной прочности с образцами из кандидатных материалов, соотнести с полученными зависимостями (2) и (3) и сделать прогноз длительной прочности на большие времена.

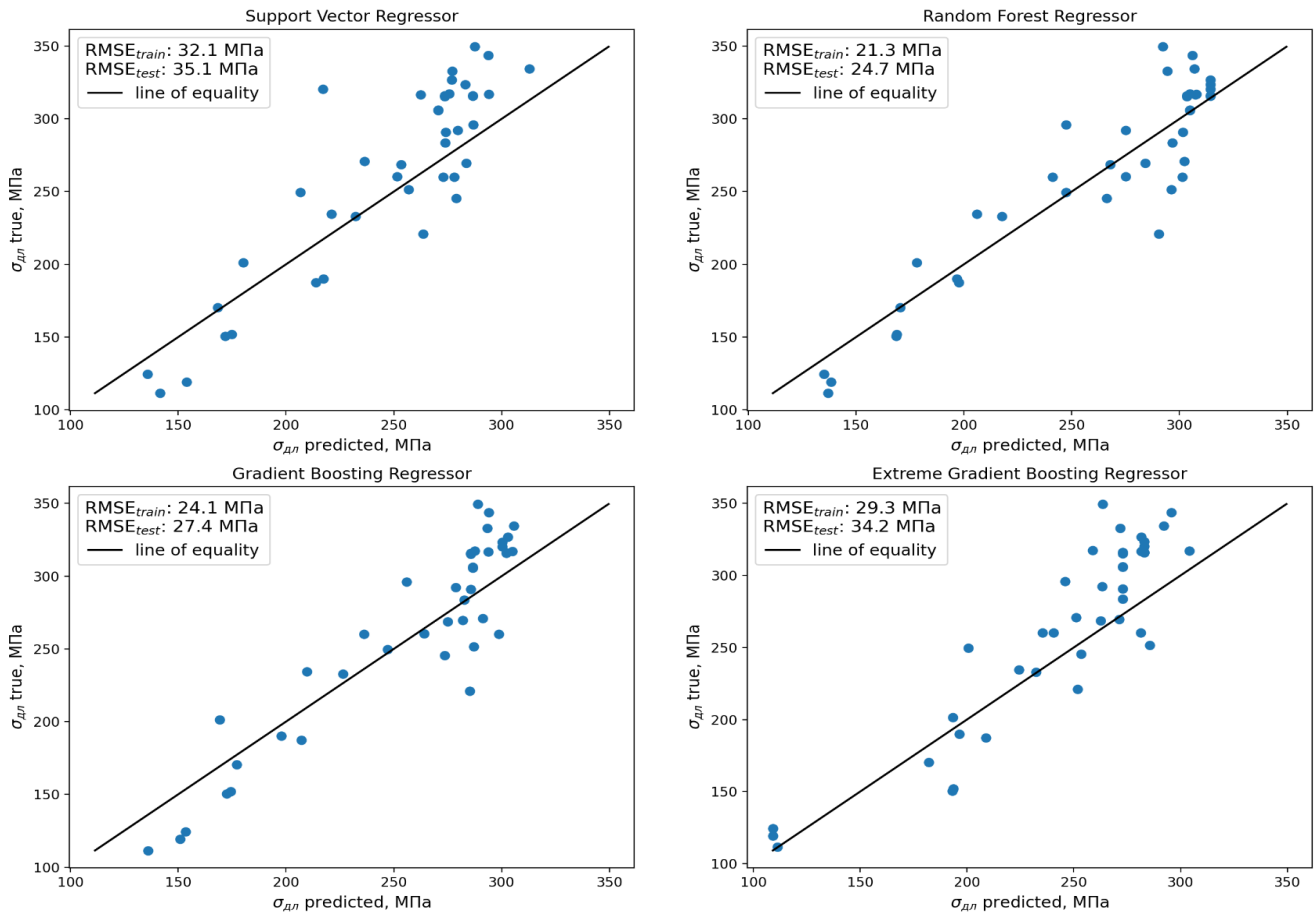


Рис. 1. Предсказания предела длительной прочности на отложенной выборке регрессионными моделями SVR, RFR, GBR и XGBR

## Литература

1. Metallic Material Database (Kinzoku) [сайт]. — URL: <https://metallicmaterials.nims.go.jp> (дата обращения 13.03.2023).
2. Abe F., Torsten-Ulf Kern, Viswanathan R. Creep-Resistant Steels. — Abington: Woodhead Publishing, 2008.

УДК 544.35.03

## Свойства циклических полиэфиров: метод молекулярной динамики

И. К. Бакулин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Молекулярное моделирование полимерных соединений представляет большой интерес для поиска принципиально новых функциональных материалов в случаях, когда эксперимент либо слишком дорог, либо трудно осуществим. Одним из таких примеров является создание полимерных мембран с

селективной проводимостью ионов в проточных Red/Ox элементах — перспективных систем накопления энергии. Метод молекулярной динамики позволяет быстро искать состав и конформации полимерных соединений, удовлетворяющих нужным свойствам мембран. Однако для его корректного применения необходим подбор силовых полей, удовлетворяющих экспериментальным данным.

В работе проводится сравнительный анализ силовых полей Смита [1] и OPLS-AA/CM1A [2] в тройной системе полиэтиленоксид–вода–ионы. Для описания воды используется модель TIP4P, параметры взаимодействия ионов взяты из модели Йоргенсена [3].

Взаимодействие полимер–вода проверяется на примере водного раствора диоксана [4] (циклический димер этиленоксида). Рассчитываются теплофизические свойства раствора (плотность, вязкость, энтальпия растворения), а также среднее число водородных связей на молекулу воды на всем диапазоне молярных концентраций диоксана. Сравнение с экспериментом показывает, что модель Смита достаточно хорошо воспроизводит экспериментальные данные по энтальпии растворения, в то время как OPLS-AA/CM1A сильно ее занижает. Малый размер кластеров диоксана в модели OPLS-AA/CM1A, по сравнению с моделью Смита, согласуется с занижением энтальпии в этой модели. Анализ количества молекул в кластерах диоксана согласуется с экспериментальными данными по рентгеновскому рассеянию [5] на образцах малой концентрации.

Взаимодействие полимер–ион проверяется на примере образования комплексов молекулой 18-краун-6 эфира [6] (циклический полимер этиленоксида, 6 звеньев) с ионами щелочных металлов. Расчет энергий образования комплексов проводится при помощи потенциала средней силы. Сравнение рассчитанных энергий с экспериментальными данными показывает, что модель OPLS-AA/CM1A воспроизводит свойство селективности краун-эфира, начиная с иона  $K^+$ , а в модели Смита образование комплекса не происходит.

Автор выражает благодарность Н. Д. Кондратьюку, А. В. Ланкину и Г. Э. Норману за наставления и продуктивные научные дискуссии. Работа подготовлена в ходе исследований в рамках Программы академического лидерства «Приоритет 2030» в МФТИ (НИУ).

### Литература

1. *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(15). P. 1480–1488.
2. *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(W1). P. W331–W336.
3. *Jensen K. P., Jorgensen W. L.* Halide, ammonium, and alkali metal ion parameters for modeling aqueous solutions // *J. Chem. Theory Comput.* 2006. V. 2(6). P. 1499–1509.
4. *Bakulin I., Kondratyuk N., Lankin A., Norman G.* Properties of aqueous 1, 4-dioxane solution via molecular dynamics // *J. Chem. Phys.* 2021. V. 155(15): 154501.
5. *Takamuku T.* [et al.] Structure and dynamics of 1, 4-dioxane-water binary solutions studied by X-ray diffraction // *J. Mol. Liq.* 1999. Vol. 83(1–3). P. 163–177.
6. *Bakulin I. K., Kondratyuk N. D., Lankin A. V., Norman G. E.* Molecular dynamics simulation of ion binding in aqueous solution of 18-crown-6 ether // *J. Phys. Conf. Ser.* 2021. V. 1787(1): 012010.

УДК 538.915

### Использование диаграммного расширения DMFT для приближенного вычисления динамических свойств системы коллективизированных электронов в фазе с волной спиновой плотности в режиме сильных корреляций

*И. А. Горемыкин, А. А. Катанин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Для исследования свойств состояния с антиферромагнитным (несоизмеримым) магнитным порядком системы коллективизированных электронов, описываемых однозонной моделью Хаббарда в режиме сильных корреляций, авторами данной работы было реализовано диаграммное расширение динамической теории среднего поля (DMFT) [1]. Указанное расширение было использовано для исследования стабильных фаз с дальним соизмеримым или несоизмеримым магнитным порядком при конечной температуре и вычислению корреляционных функций, поддающихся непосредственному сравнению с экспериментальными данными.



В нашей постановке задачи отправной точкой является статистическая сумма, записанная в виде интеграла по траекториям:

$$Z = \int \prod_{i\sigma} [Dc_{i\sigma} Dc_{i\sigma}^+] e^{-S[c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^+]}, \quad (1)$$

где действие  $S[c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^+]$ , записанное в мнимом времени, имеет вид

$$S[c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^+] = \int_0^\beta d\tau \left( \sum_{i,j,\sigma} \left( \delta_{ij} c_{i\sigma}^+ \left( \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{j\sigma} - t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} \right) + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right). \quad (2)$$

В рамках данного подхода нами были рассмотрены состояния системы, характеризующиеся наличием дальнего магнитного порядка и сильными магнитными флуктуациями. Для этого в исходной модели (1) на каждом узле унитарным преобразованием вида

$$d_{i\sigma} = R_\sigma^{\sigma'}(\theta) c_{i\sigma}, \quad (3)$$

совершается переход в локальную систему координат и меняется локальное направление оси квантования спина.

Нами рассматривались электроны на квадратной решетке с законом дисперсии, в котором были учтены перескоки между ближайшими и следующими после ближайших соседями с амплитудами перескока  $t$  и  $t'$  соответственно:

$$\varepsilon(\vec{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y. \quad (4)$$

Основной интерес представляет не сама статистическая сумма в форме (1), а различные корреляторы, вычисляемые посредством того же распределения вероятности по пространству путей. В частности, в рамках этой работы основной целью было рассчитать электронные функции Грина  $G_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, i\nu_n)$ , являющиеся фурье-образами корреляторов вида

$$G_{i\sigma, j\sigma'}(\tau) = \frac{1}{Z} \int \prod_{i\sigma} [Dc_{i\sigma} Dc_{i\sigma}^+] c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma'}^+(0) e^{-S[c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^+]}, \quad (5)$$

и обобщенную спиновую восприимчивость  $\chi^{\alpha\beta}(\vec{q}, i\omega_n)$ , являющуюся Фурье-образом корреляторов спиновых операторов:

$$\chi_{ij}^{\alpha\beta}(\tau) = \frac{1}{Z} \int \prod_{i\sigma} [Dc_{i\sigma} Dc_{i\sigma}^+] S_i^\alpha(\tau) S_j^\beta(0) e^{-S[c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^+]}. \quad (6)$$

Аналитическое продолжение  $G_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, i\nu_n)$  на действительную частотную ось содержит полную информацию о спектре электронов и дырок. В свою очередь аналитическое продолжение  $\chi^{\alpha\beta}(\vec{q}, i\omega_n)$  на действительную частотную ось позволяет изучить спектр магнонов.

Идея DMFT заключается в том, чтобы полностью учесть все локальные корреляции, отобразив исходную задачу на решетке (1) на одноузельную модель с действием  $S[c_\sigma, c_\sigma^+]$ :

$$S[c_\sigma, c_\sigma^+] = \int_0^\beta d\tau d\tau' c_\sigma^+(\tau) \zeta^{-1}(\tau - \tau') c_\sigma(\tau') + \int_0^\beta d\tau U n_\uparrow n_\downarrow. \quad (7)$$

По аналогии с теорией среднего поля для динамического поля  $\zeta$  можно записать уравнения самосогласования теории. Их можно решить численно благодаря тому факту, что модель (7) поддается полному численному решению квантовым методом Монте-Карло в непрерывном времени (СТQMC).

Диаграммное разложение относительно DMFT решения позволяет, также численно, найти нелокальные характеристики системы, а именно восприимчивость (6).

Мы использовали метод СТQMC и DMFT инфраструктуру из пакета iQIST [2]. Эти программные средства были дополнены нашими собственными расчетными кодами, а также высокоуровневыми средствами анализа полученных результатов на языке Python. Для выполнения аналитического продолжения был использован пакет `ana_cont` [3], в основе которого лежит байесовский подход к регуляризации плохо-обусловленной задачи.

Для численного расчета использовался следующий набор параметров:  $t=1,0$ ,  $t'=0,15$ ,  $U=7,5$ , температура  $T=0,1$ .

На рис. 1 приведен спектр возбуждений дырочного типа для состояния системы с несоизмеримым магнитным порядком при уровне дырочного допирования  $x=0,11$ . Тот факт, что дисперсионная кривая пересекает уровень Ферми  $\nu=0$ , говорит о том, что при повышении уровня допирования система становится проводящей, тогда как она является антиферромагнитным изолятором при уровнях допирования  $x < 0,05$ .

На рис.2 приведен спектр магнонов для антиферромагнитного изоляторного состояния системы вблизи половинного заполнения при  $x=0,02$ . Значение амплитуды перескока  $t$ , служащей единицей энергии, подобрано равным  $t=440$  мэВ, для сравнения с экспериментальными данными неупругого нейтронного рассеяния на  $\text{LaCuO}_4$  (синие кресты) [4]. В пределах погрешности экспериментальных данных удалось добиться полного соответствия результатов наших расчетов эксперименту. В частности, удалось надежно воспроизвести локальный максимум дисперсии магнонов вблизи точки  $(\pi, 0)$ .

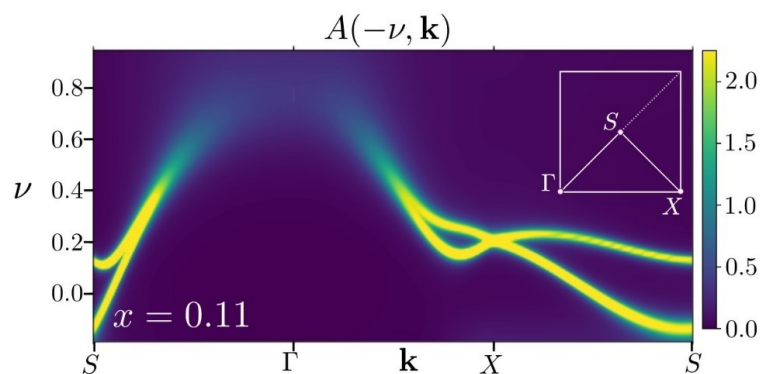


Рис. 1. Спектр дырочных возбуждений для системы с несоизмеримым магнитным порядком при уровне дырочного допирования  $x=0,11$

Таким образом, нами был разработан подход к изучению магнитных систем на основе широкого класса модельных систем (метод обобщается на многозонную модель Хаббарда на произвольной решетке), чьи параметры могут быть получены на основе *ab initio* расчетов, в частности DFT. Метод был реализован нами в виде расчетных кодов и успешно применен на практике. Полученные численные результаты совпадают с имеющимися экспериментальными данными для некоторых классов соединений, в которых сильны магнитные флуктуации.

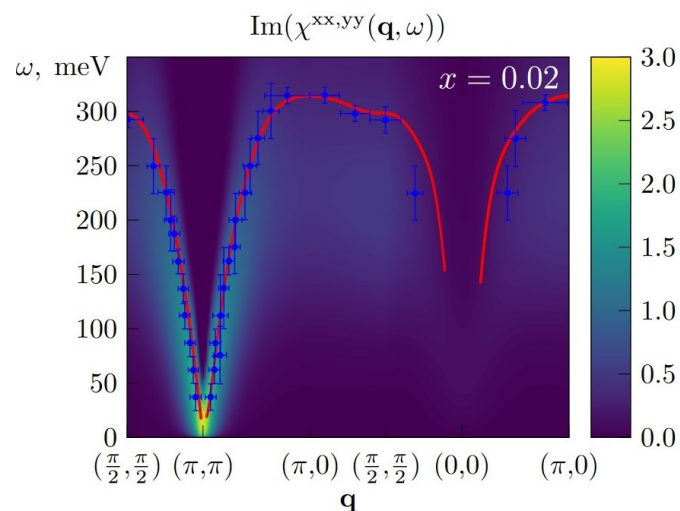


Рис. 2. Спектральная плотность магнонов в логарифмическом цветовом масштабе для антиферромагнитного состояния системы при уровне дырочного допирования  $x=0,02$ . Синие кресты — экспериментальные данные из работы [4]

## 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.* 1996. V. 68(1). P. 13–125.
2. *Huang L.* [et al.]. iQIST: An open source continuous-time quantum Monte Carlo impurity solver toolkit // *Comput. Phys. Commun.* 2015. V. 195. P. 140–160.
3. *Kaufmann J., Held K.* ana\_cont: Python package for analytic continuation // arXiv preprint. [2021]. arXiv: 2105.11211. URL: [https://github.com/josefkaufmann/ana\\_cont](https://github.com/josefkaufmann/ana_cont) (дата обращения: 13.03.2023).
4. *Coldea R.* [et al.]. Spin Waves and Electronic Interactions in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  // *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 86(23). P. 5377–5380.

УДК 532.72

## Протонный перенос в воде

*В. Д. Негодин<sup>1,2</sup>, А. В. Ланкин<sup>1,2</sup>, Г. Э. Норман<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Изучаются коэффициент самодиффузии воды и коэффициенты диффузии ионов  $\text{H}_3\text{O}^+$  и  $\text{OH}^-$  в воде. Исследование проводится методом молекулярной динамики путем моделирования жидкой воды без добавок, а также воды с добавлением иона  $\text{H}_3\text{O}^+$  или  $\text{OH}^-$ . В качестве потенциала взаимодействия выбран реакционный потенциал ReaxFF [1], основной особенностью которого является динамическое образование и разрушение связей, что позволяет моделировать химические реакции, в том числе и протонный перенос, используя только классические методы без квантово-механических расчетов. Потенциальная энергия системы такого потенциала задается по формуле

$$E_{\text{system}} = E_{\text{bond}} + E_{\text{over}} + E_{\text{under}} + E_{\text{val}} + E_{\text{tors}} + E_{\text{specific}} + E_{\text{vdWaals}} + E_{\text{Coulomb}},$$

где первый член отвечает за энергию связей; второй и третий штрафует за недостаточное/избыточное количество связей у атома; четвертый член — это вклад энергии валентных углов, пятый — торсионных углов; в шестой член входят специфичные для рассматриваемой системы вклады в энергию, для воды это энергия водородных связей и энергия пар валентных электронов, не участвующих в связях; последние два члена, соответственно, отвечают за ван-дер-ваальсовое и кулоновское взаимодействия. В качестве коэффициентов потенциала выбраны три набора, разработанные для моделирования воды: water\_2017 [2] — набор, оптимизированный для моделирования транспортных свойств воды; CHON-2017\_weak [3] — набор для моделирования углеводородов в воде, который хорошо показал себя для чистой воды; qeq\_ff.water [4] — более старый потенциал, выбранный для сравнения.

Коэффициенты (само)диффузии вычисляются из соотношения Эйнштейна:

$$6Dt = \langle |\Delta r(t)|^2 \rangle.$$

Для этого строится зависимость среднего квадрата смещения молекул или ионов относительно начального положения от времени  $|\Delta r(t)|^2$ . При расчете коэффициента самодиффузии воды усреднение берется по всем молекулам воды, а при расчете коэффициентов диффузии ионов  $\text{H}_3\text{O}^+$  и  $\text{OH}^-$  в воде усреднение берется по траекториям, полученным выбором начального положения иона в разные моменты времени.

Моделирование проводится для систем воды с плотностью  $0,997 \text{ г/см}^3$  при температуре 300 К и давлении 1 атм. Рассматриваются системы из 216, 1000, 2744 и 8000 молекул воды. Для расчета коэффициента диффузии ионов  $\text{H}_3\text{O}^+$  и  $\text{OH}^-$  случайная молекула воды заменяется на соответствующий ион. При моделировании чистой воды расчеты были проведены 9 раз с разным зерном генератора случайных чисел для усреднения полученных результатов, а при моделировании иона в воде расчеты были произведены 36 раз. Начальным положением молекул был выбран кристалл льда, который плавился, а затем проводилась стабилизация системы, после которой начинался расчет смещений молекул.

Результаты расчета коэффициента самодиффузии воды для всех трех рассматриваемых наборов коэффициентов потенциала ReaxFF представлены на рис. 1 в зависимости от линейного размера моделируемой системы. Проведена экстраполяция результатов к бесконечно большой системе. Точки хорошо ложатся на прямые при экстраполяции. Экспериментальное значение коэффициента самодиффузии молекул воды равно  $D = (2,41 \pm 0,02) \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$  [5]. Полученные результаты согласуются с экспериментальным, превышая его не более чем в 1,5 раза. Результаты расчета коэффициента диффузии ионов  $\text{H}_3\text{O}^+$

и  $\text{OH}^-$  в воде для всех трех потенциалов также в зависимости от линейного размера системы представлены на рис. 2 и 3. Экспериментальные значения коэффициентов диффузии ионов  $\text{H}_3\text{O}^+$  и  $\text{OH}^-$  в воде соответственно  $9,3 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$  и  $5,6 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$  [6]. Превышение относительно экспериментальных данных получилось в 1,5 и в 3 раза соответственно.

Таким образом, с помощью потенциала ReaxFF для воды были рассчитаны коэффициенты самодиффузии молекул воды и коэффициенты диффузии ионов  $\text{H}_3\text{O}^+$  и  $\text{OH}^-$  в воде. Были получены результаты, превышающие экспериментальные, однако достигнуто превышение не более чем в 3 раза для иона  $\text{OH}^-$ .

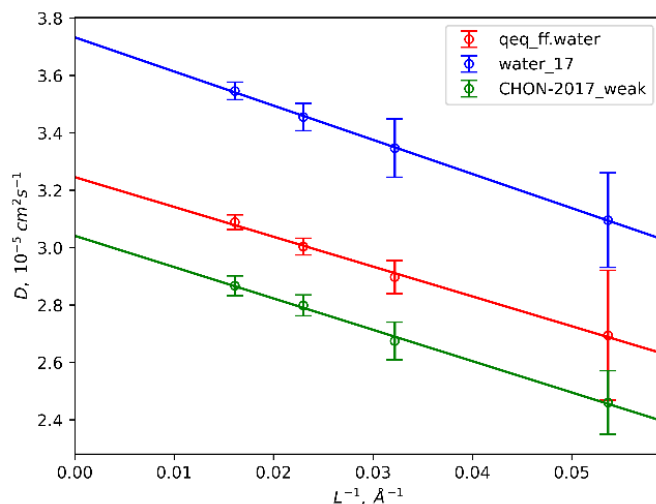


Рис. 1. Коэффициенты самодиффузии молекул воды для трех наборов коэффициентов потенциала ReaxFF. Плотность  $0,997 \text{ г}/\text{см}^3$ , температура  $300 \text{ К}$

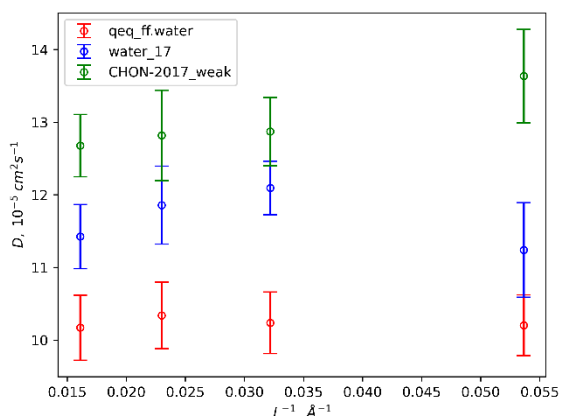


Рис. 2. Коэффициенты диффузии иона  $\text{H}_3\text{O}^+$  в воде для трех наборов коэффициентов потенциала ReaxFF. Плотность  $0,997 \text{ г}/\text{см}^3$ , температура  $300 \text{ К}$

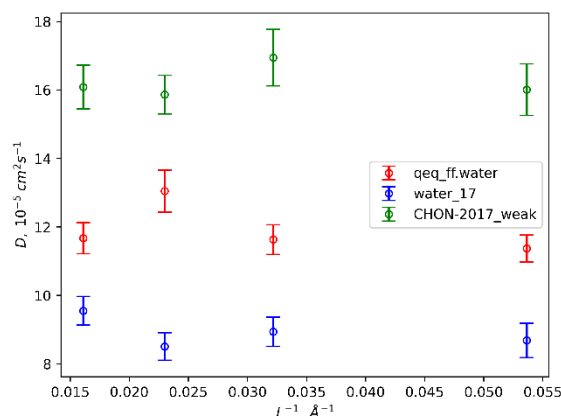


Рис. 3. Коэффициенты диффузии иона  $\text{OH}^-$  в воде для трех наборов коэффициентов потенциала ReaxFF. Плотность  $0,997 \text{ г}/\text{см}^3$ , температура  $300 \text{ К}$

## Литература

1. Van Duin A. [et al.]. ReaxFF: A reactive force field for hydrocarbons // J. Phys. Chem. A. 2001. V. 105. P. 9396–9409.
2. Zhang W., Van Duin A. Second-generation ReaxFF water force field: Improvements in the description of water density and OH-anion diffusion // J. Phys. Chem. B. 2017. V. 121. P. 6021–6032.
3. Zhang W., Van Duin A. Improvement of the ReaxFF description for functionalized hydrocarbon/water weak interactions in the condensed phase // J. Phys. Chem. B. 2018. V. 122(14). P. 4083–4092.
4. Achtyl J. [et al.]. Aqueous proton transfer across single-layer graphene // Nat. Comm. 2015. V. 6: 6539.
5. Holz M., Heil S. R., Sacco A. Temperature-dependent self-diffusion coefficients of water and six selected molecular liquids for calibration in accurate 1H NMRPFG measurements // Phys. Chem. Chem. Phys. 2000. V. 2. P. 4740–4742.
6. Light T. S., Licht S., Bevilacqua A. C., Morash K. R. The fundamental conductivity and resistivity of water // Electrochem. Solid-State Lett. 2005. V. 8. P. E16–E19.

## Молекулярная динамика водных протонных катионов на интегралах по траекториям

*А. Е. Качесов, С. С. Жуков, К. А. Мотовилов*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Метод интегралов по траекториям был предложен Фейнманом в 1948 г. Позднее была предложена идея использовать такой формализм для учета ядерных квантовых эффектов в методе молекулярной динамики, которые, как было показано в работе [1], дают значимый вклад даже при комнатной температуре.

Основная идея метода сводится к представлению ансамбля атомов в виде большого количества систем с разными микроконфигурациями, которые связаны между собой пружинками, образующими циклическую цепь. При таком подходе атом представляет собой так называемый кольцевой полимер, каждая частица которого имеет связи с другими атомами своей микроконфигурации (рис. 1) [2].

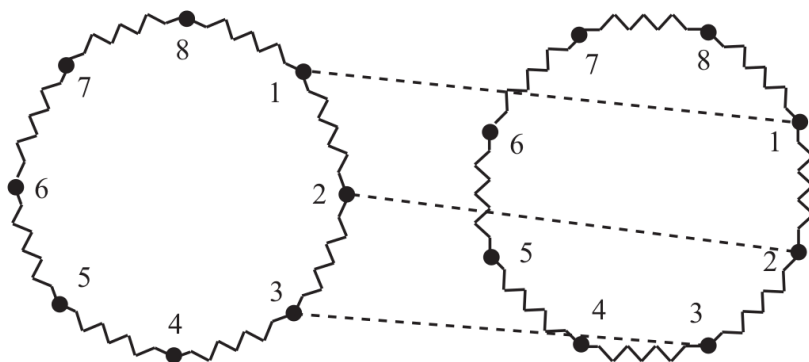


Рис. 1: Взаимодействие двух частиц в соответствующих репликах в представлении подхода молекулярной динамики на интегралах по траекториям

В работе [3] было показано, что метод молекулярной динамики на интегралах по траекториям позволяет получить лучшую сходимость с экспериментальными данными, нежели классическая молекулярная динамика, для жидкой воды. Нас интересовал потенциал данного подхода в контексте задачи о стабильности различных протонных водных катионов в зависимости от температуры, pH, а также приложенного внешнего электрического поля.

Для проверки была выбрана модель воды tip4p/2005 [4], которая хорошо воспроизводит результаты (с небольшими поправками) для всей фазовой диаграммы воды. В качестве источника протонов была выбрана соляная кислота. Метод молекулярной динамики на интегралах по траекториям реализовывался посредством программных пакетов *lammmps* [5] для расчета сил и *i-pi* [6] для расчетов координат каждого звена кольцевого полимера.

Для всех расчетов количество звеньев в цепи было равно шести. Вычисления производились в периодических граничных условиях. Частицы взаимодействовали посредством кулоновского потенциала и потенциала Леннард–Джонса (6-12), который обрезался на расстоянии 9 Å. Для расчета кулоновского взаимодействия использовалось суммирование Эвальда. Параметры потенциала 6-12 для ионов Cl<sup>-</sup> были взяты из статьи [7]. Параметризация такого взаимодействия для протонов с другими типами частиц описана в работе [8]. В свете отсутствия у протонов электронной оболочки для получения коэффициентов взаимодействия использовалось арифметическое правило смешивания [9].

На первом шаге решалась задача получения корректной плотности воды. Для этого 216 молекул H<sub>2</sub>O релаксировали при постоянных давлении и температуре (NpT-ансамбль) до достижения сходимости. Для расчета объема области моделирования были использованы экспериментальные данные [10] о плотности соляной кислоты. Далее в данной области вода релаксировалась, а затем равномерно разыгрывались координаты пятидесяти пар ионов Cl<sup>-</sup> и H<sup>+</sup>, что соответствует 13-молярному раствору соляной кислоты.

На рис. 2 представлены радиальные функции распределения (РФР) вновь внесенных частиц относительно остальных. Итоговые РФР получены посредством усреднения РФР, полученных от каждого звена кольцевого полимера.

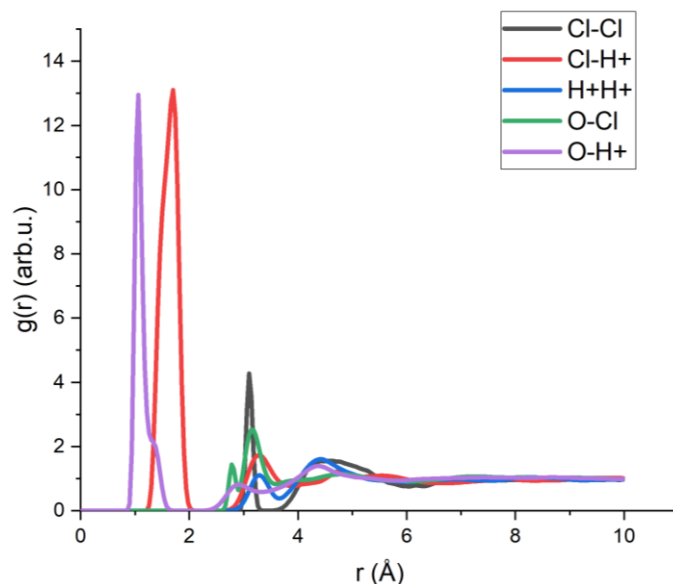


Рис. 2. Радиальные функции распределения внесенных ионов  $\text{Cl}^-$  и  $\text{H}^+$  относительно других частиц в системе

Полученная система релаксировала для достижения равновесной плотности в  $NpT$ -ансамбле в течение 10 пикосекунд с временным шагом 0,25 фемтосекунд. Затем моделирование производилось при постоянных объеме и температуре ( $NVT$ -ансамбль) в течение 50 пс с тем же временным шагом. Все расчеты производились в нормальных условиях.

В результате были получены РФР тем же образом, что и ранее (рис. 3). Можно видеть наличие пика на длинах, соответствующих характерным расстояниям между соответствующими частицами в катионе Цунделя. Также был проведен анализ углов полученных катионов, что позволило судить о наличии в растворе не только катиона Цунделя, но и гироксония.

Кроме того, была проведена оценка количества и длины водородных связей, возникающих как в воде, так и в водном растворе соляной кислоты. С этой целью вода моделировалась в своем равновесном объеме в  $NVT$ -ансамбле. Среднее количество водородных связей на молекулу воды составило 3,47, для исследуемого раствора соляной кислоты 1,99. «Обрезка» водородной связи производилась по длине 3,5 Å и  $120^\circ$  по углу.

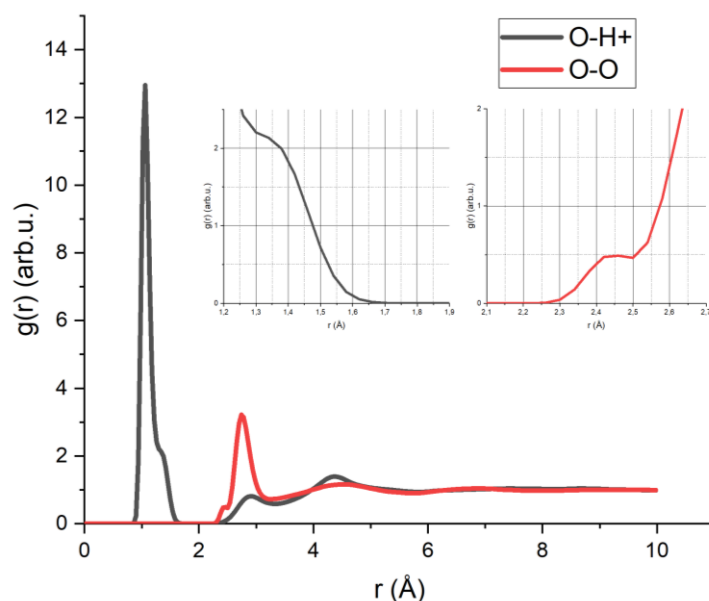


Рис. 3. Радиальные функции распределения 13-молярного раствора соляной кислоты

На рис. 4. представлено изображение катиона Цунделя, полученное посредством моделирования выбранным методом. Красные шарики соответствуют атомам кислорода, белые — протонам.

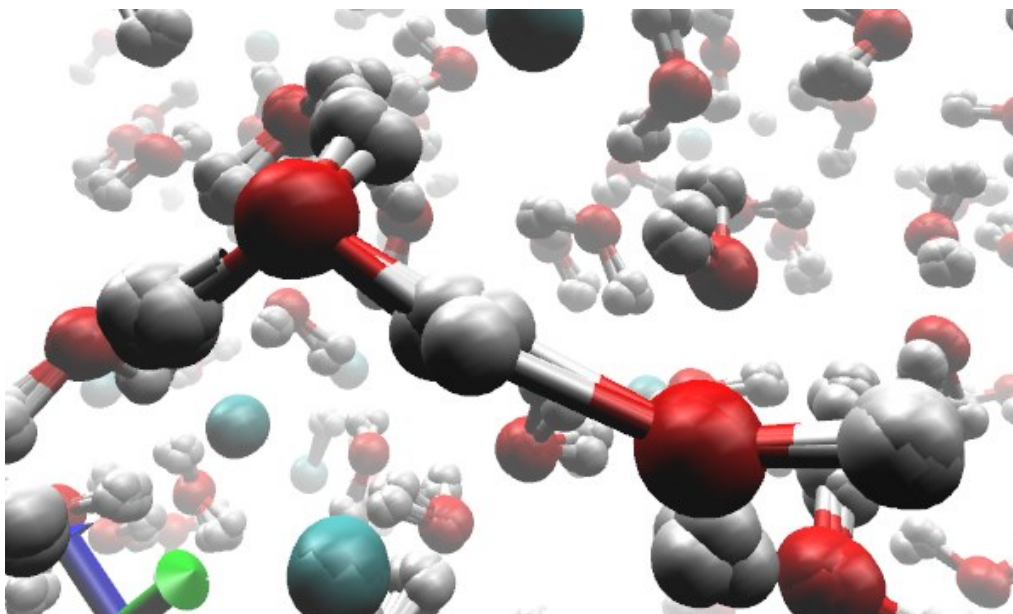


Рис. 4. Набор микроконфигураций катиона Цунделя в 13-молярном растворе соляной кислоты

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-73-10154.

### Литература

1. *Tuckerman M.E., Marx D.* Heavy-atom skeleton quantization and proton tunneling in “Intermediate-Barrier” hydrogen bonds // *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 86. P. 4946–4949.
2. *Tuckerman M.E.* Statistical mechanics: Theory and molecular simulation. — New York: Oxford University Press, 2015.
3. *Habershon S., Markland T.E., Manolopoulos D.E.* Competing quantum effects in the dynamics of a flexible water model // *J. Chem. Phys.* 2009. V. 131(2): 024501.
4. *McBride C.* [et al.]. Quantum contributions in the ice phases: The path to a new empirical model for water-TIP4PQ/2005 // *J. Chem. Phys.* 2009. V. 131(2): 02456.
5. *Thompson A.P.* [et al.]. LAMMPS — a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // *Comp. Phys. Comm.* 2022. V. 271: 10817.
6. *Kapil V.* [et al.]. i-PI 2.0: A universal force engine for advanced molecular simulations // *Comp. Phys. Comm.* 2018. V. 236. P. 214–223.
7. *Loche P.* [et al.]. Transferable ion force fields in water from a simultaneous optimization of ion solvation and ion–ion interaction // *J. Phys. Chem. B.* 2021. V. 125. P. 8581–8587.
8. *Bruni F.* [et al.]. Eigen versus Zundel complexes in HCl-water mixtures // *J. Chem. Phys.* 2006. V. 125(1): 014508.
9. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. — New York: Oxford University Press, 1987.
10. *Лазарев А. И.* [и др.]. Справочник химика-аналитика. — М.: Металлургия, 1976.

УДК 533.9.01

### Численное исследование динамических и структурных свойств цепочек пылевых частиц в потоке плазмы газового разряда

*Д. А. Колотинский<sup>1,2</sup>, А. В. Тимофеев<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Формирование пылевых частиц в цепочечные структуры в потоке плазмы — хорошо известное явление, присущее экспериментальным условиям, типичным для плазмы ВЧ-разряда или разряда постоянного тока [1]. Структурно-динамические свойства образующихся цепочек неразрывно связаны с окружающей их плазменной средой. Из-за высокой сложности взаимозависимости параметров пылевой и плазменной компонент аналитические подходы к описанию таких систем практически неприменимы, и следует использовать численные. Численный расчет динамики потока плазмы вокруг пылевых частиц с учетом самосогласованной зарядки является очень ресурсоемкой задачей, и для ее решения необходимо использовать

высокооптимизированные программные коды. Ранее нами был разработан программный код на базе GPU OpenDust [2] для самосогласованного расчета сил, действующих на пылевые частицы, находящиеся в потоке плазмы. Здесь мы используем OpenDust для изучения различных структурных и динамических свойств цепочек пылевых частиц, одновременно рассчитывая динамику пылевой и плазменной компонент. Характерный вид цепочечной структуры пылевых частиц при моделировании представлен на рис. 1.

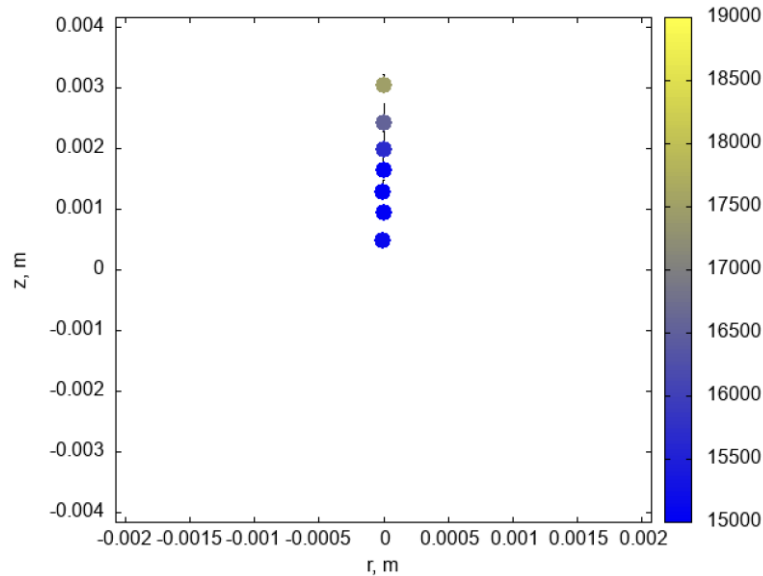


Рис. 1. Характерный вид цепочечной структуры пылевых частиц при моделировании, включающем динамику плазменной и пылевой компонент. Самосогласованные заряды пылевых частиц показаны цветом в единицах заряда электрона

### Литература

1. Kong J. [et al.]. Interaction force in a vertical dust chain inside a glass box // Phys. Rev. E. 2014. V. 90(1): 013107.
2. Kolotinskii D., Timofeev A. OpenDust: A fast GPU-accelerated code for calculation forces, acting on microparticles in a plasma flow // arXiv preprint. [2022]. arXiv: 2205.06557.

УДК 577.332

## Эволюция молекулярного механизма ингибирования пенициллин-связывающих белков цефтриаксоном

А. В. Кривицкая<sup>1</sup>, М. Г. Хренова<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ФИЦ Биотехнологии РАН

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Пенициллин-связывающие белки (ПСБ) являются критически важными ферментами в формировании клеточной стенки бактерий. Ингибирование ПСБ используется при лечении различных заболеваний. Известно, что  $\beta$ -лактамы антибиотики встраиваются в активный центр транспептидазного домена ПСБ вместо природного субстрата, необратимо ингибируя таким образом действие фермента, что вызывает гибель бактерии. Однако известны случаи резистентности к  $\beta$ -лактамам антибиотикам. Для  $\beta$ -лактамов преобладающими механизмами устойчивости являются модификация мишени и инактивация антибиотиков бактериальными ферментами  $\beta$ -лактамазами. Под модификацией мишени чаще всего имеются ввиду появление мутаций, изменяющих молекулярный механизм действия пенициллин-связывающих белков.

В данной работе рассмотрено изменение молекулярного механизма ингибирования, опосредованное появлением мутаций в пенициллин-связывающем белке 2 из грамотрицательной бактерии *Neisseria Gonorrhoeae*, которая вызывает гонорею. Антибиотик  $\beta$ -лактамного ряда цефтриаксон в настоящее время является единственным препаратом, используемым для лечения гонореи. Однако из клинической практики сообщается о случаях резистентности к нему. Известны дикий штамм ПСБ2 из *Neisseria Gonorrhoeae* FA19, не проявляющий устойчивость к пенициллину, и штаммы 35/02 и H041, обладающие рядом



мутаций, которые позволяют им проявлять устойчивость к действию антибиотиков. Экспериментальные данные по константам эффективности ( $k_2/K_s$ ) демонстрируют, что эффективность ингибирования падает в 150 раз и 2300 раз для 35/02 и H041 соответственно. Для FA19 из литературы известны индивидуальные параметры ( $k_2$  и  $K_s$ ), но для мутантных форм определить их экспериментально не представляется возможным. Деацилирование происходит медленно, поэтому считается, что реакция происходит необратимо. Таким образом, рост резистентности с точки зрения молекулярного механизма связан либо со снижением сродства ПСБ2 к цефтриаксону, либо со снижением скорости ацилирования.

В работе проведено молекулярное моделирование механизма реакции ингибирования ПСБ2 из штаммов FA19, 35/02 и H041 антибиотиком цефтриаксон методом молекулярной динамики с КМ/ММ потенциалами. Рассчитаны молекулярно-динамические траектории фермент-субстратных комплексов, позволяющие проанализировать состояния активных центров. Показано, что изменение положение субстрата в активном центре фермент-субстратного комплекса ввиду мутации G545S отражается в формировании оксианионного центра и, как следствие, высоте энергетического барьера первой стадии реакции. Анализ молекулярно-динамических траекторий фермент-субстратных комплексов, в частности, электронно-плотными дескрипторами, позволил идентифицировать набор структур как реакционные и нереакционные. Показано, что доля реакционных структур падает с ростом резистентности. Просканирована поверхность свободной энергии Гиббса, определены элементарные стадии реакции. Установлено, что механизм реакции в мутантных ПСБ2 и из штамма дикого типа отличаются: разрыв связи C–N и отрыв фрагмента антибиотика происходит последовательно в белке из штамма дикого типа и одновременно в мутантных белках. Новое положение субстрата в каталитическом кармане также влечет за собой изменения сродства к антибиотику. Анализируя конформационные изменения петли  $\beta$ 3– $\beta$ 4, показано, что с ростом резистентности сродство ПСБ2 к цефтриаксону понижается.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 18-74-10056).

### Литература

1. *Stefanova M. E., Tomberg J., Olesky M., Holtje J.-V., Gultheil W. G., Nicholas R. A.* Neisseria gonorrhoeae Penicillin-Binding Protein 3 Exhibits Exceptionally High Carboxypeptidase and  $\beta$ -Lactam Binding Activities // *Biochemistry*. 2003. V. 42. P. 14614–14625.
2. *Tomberg J., Unemo M., Ohnishi M., Davies C., Nicholas R.A.* Identification of Amino Acids Conferring High-Level Resistance to Expanded-Spectrum Cephalosporins in the penA Gene from Neisseria gonorrhoeae Strain H041 // *Antimicrob. Agents Chemother.* 2013. V. 57. P. 3029–3036.

УДК 577.332

### Влияние структуры активного центра на эффективность активации субстратов в активных центрах металло- $\beta$ -лактамаз

*Л. Б. Каримуллина<sup>1,2</sup>, А. В. Кривицкая<sup>2,3</sup>, М. Г. Хренова<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

<sup>2</sup>ФИЦ Биотехнологии РАН

<sup>3</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

На сегодняшний день  $\beta$ -лактамы антибиотики составляют около 70% от всех применяемых антибактериальных препаратов. Однако их эффективность резко снижается в связи с распространением по всему миру бактерий с множественной лекарственной устойчивостью. Превалирующим среди всех механизмов антибиотикорезистентности является экспрессия бактериальных ферментов  $\beta$ -лактамаз. Обусловленная  $\beta$ -лактамазами резистентность к  $\beta$ -лактамам антибиотикам стала серьезной угрозой для современной системы здравоохранения. В активном центре  $\beta$ -лактамаз реакция инициируется нуклеофильной атакой на карбонильный углерод  $\beta$ -лактамного кольца, что в дальнейшем приводит к разрыву связи углерод–азот и необратимой инактивации антибактериального средства. Согласно структурным особенностям, в соответствии с классификацией Амблера выделяют 4 класса  $\beta$ -лактамаз (А, В, С и D), среди которых существуют две группы ферментов, отличающихся между собой по механизму инактивации  $\beta$ -лактамов: серин- $\beta$ -лактамазы (А, С, D) и металло- $\beta$ -лактамазы (В). Металло- $\beta$ -лактамазы содержат в активном центре один или два катиона цинка. Ферменты класса В разделяют на три подкласса (В1, В2 и В3) на основании схожести аминокислотных последовательностей. Металло- $\beta$ -лактамазы способны гидролизовать карбапенемы, которые чаще всего не поддаются действию сериновых- $\beta$ -лактамаз и являются

антибиотиками с самым широким спектром активности. Более того, металло- $\beta$ -лактамазы не чувствительны к терапевтическим ингибиторам  $\beta$ -лактамаз. Подкласс B1 считается наиболее клинически значимым и включает  $\beta$ -лактамазы IMP, VIM и NDM. Фермент NDM-1 гидролизует широкий класс  $\beta$ -лактамов, в том числе относящихся к антибиотикам последней линии защиты. С момента открытия NDM-1 в 2008 г. было предложено множество ингибиторов различной природы, но лишь немногие из них показали достаточную эффективность. Проблема антибиотикорезистентности является нетривиальной многокомпонентной задачей. Для ее решения задействованы специалисты из различных областей и применяется широкий спектр научных методов исследования, в том числе молекулярное моделирование. Молекулярное моделирование позволяет прояснить молекулярные механизмы элементарных стадий реакции в активном центре фермента, идентифицировать взаимодействия, которые являются ключевыми для выполнения того или иного процесса, построить зависимости структура–свойство и с их помощью спрогнозировать потенциальную структуру нового лекарственного средства. Понимание молекулярного механизма в первую очередь дополняет фундаментальные знания о исследуемом процессе, но также может и применяться для разработки новых механизмов ответа антибиотикорезистентности.

В данной работе были исследованы активные центры двух металло- $\beta$ -лактамаз: NDM-1, так как он имеет клиническую значимость, и L1, так для этого фермента известны значения констант скоростей элементарных стадий реакции с нитроцефином, что позволяет валидировать расчеты. L1 относится к подклассу B3. Активные центры обоих ферментов содержат два катиона цинка ( $Zn1^{2+}$  и  $Zn2^{2+}$ ), соединенных мостиковым гидроксид-ионом  $OH^-$ . Первый катион цинка у обоих ферментов координируется тремя остатками гистидина, каталитическим гидроксид-анионом и карбонильной группой субстрата. Координационная сфера второго катиона цинка у данных ферментов отличается только на один остаток: у L1 это остаток гистидина, в то время как у NDM-1 — остаток цистеина. Значимой структурной особенностью является разный аминокислотный состав петли 10, накрывающей активный центр в обоих ферментах. В L1 над активным центром находится гидрофобный жесткий аминокислотный остаток Pro226, что делает положение субстрата в активном центре структурно более жестким, малоподвижным. В NDM-1 над субстратом находится гибкий Gly219, вследствие чего активный центр NDM-1 более подвижен.

Данная работа посвящена исследованию влияния эффекта активации субстрата ферментами в активном центре L1 и NDM-1 на величину энергетических барьеров первой стадии реакции инактивации антибиотиков. Для этой цели рассмотрены комплексы L1-имипенем и NDM-1-имипенем для того, чтобы исследовать различия активации одного и того же субстрата в разных активных центрах, а также комплекс L1-нитроцефин, по которому, во-первых, проводилась валидация используемых методов, а во-вторых, для сравнения активации двух разных субстратов в одном и том же активном центре. Нитроцефин — это хромогенный субстрат цефалоспоринового ряда, обычно используемый для определения присутствия ферментов  $\beta$ -лактамаз, выделяемых различными бактериями. Имипенем отличается от других  $\beta$ -лактамов своим широким спектром активности в отношении многих патогенов. Активация субстрата в активном центре фермента происходит за счет формирования связей между ферментом и субстратом, которые подготавливают субстрат к реакции. Оксанионный центр ферментов сформирован двумя координационными связями между одним катионом цинка и кислородом карбонильного фрагмента  $\beta$ -лактаманного кольца, вторым катионом цинка и азотом  $\beta$ -лактаманного кольца. Эти взаимодействия поляризуют карбонильную группу  $C=O$  и связь  $C-N$   $\beta$ -лактаманного кольца соответственно. Вследствие этих взаимодействий электрофильность карбонильного углерода возрастает, что и подготавливает субстрат к реакции, так как первый шаг реакции — это нуклеофильная атака гидроксид-аниона на карбонильный углерод  $\beta$ -лактаманного кольца субстрата. И чем большей электрофильностью обладает карбонильный углерод, тем легче должна произойти нуклеофильная атака. Для исследования эффекта активации субстрата ферментом в первую очередь проводился молекулярно-динамический расчет с потенциалами комбинированного метода квантовой механики/молекулярной механики (КМ/ММ) для фермент-субстратных комплексов с последующим анализом распределений ключевых геометрических характеристик: расстояния нуклеофильной атаки, расстояний координационных взаимодействий с субстратом и длин связей  $C=O$  и  $C-N$   $\beta$ -лактаманного кольца. Такой современный подход, как КМ/ММ МД, позволяет оценить особенности формирования фермент-субстратного комплекса и дать вероятностную характеристику эффекта активации субстрата ферментом. Для оценки реакционности субстрата использовались электронно-плотностные дескрипторы, такие как атомный индекс электрофильности Фукуи и лапласиан электронной плотности. Атомные функции Фукуи, представляющие собой разницу зарядов Хиршфельда систем в основном электронном состоянии и с добавочным электроном, позволяют оценить степень поляризации атома углерода карбонильной группы  $\beta$ -лактаманного кольца субстрата. Отрицательный лапласиан электронной плотности указывает на концентрацию электронного заряда и, следовательно, нуклеофильную природу рассматриваемой области, а положительный лапласиан электронной плотности отвечает истощению электронного

заряда и наличие электрофильной области. Таким образом, анализируя 2D-карты лапласиана электронной плотности на атоме углерода, на линии нуклеофильной атаки наблюдается зазор, когда частица является реакционной. И наоборот, если этого зазора на линии атаки нет, то структура считается неактивной.

Методом КМ/ММ рассчитаны энергетические профили первой элементарной стадии реакции. Для комплекса NDM-1 с имипенемом энергетический барьер составляет 12,5 ккал/моль, для L1 и нитроцефина — 9,5 ккал/моль. Для комплекса L1 с имипенемом энергетический барьер имеет наименьшее значение — 5,5 ккал/моль. Такие значения энергетических барьеров неразрывно связаны с эффектом активации субстрата ферментом, на который влияет структурная подвижность активного центра и размер субстрата. В более жестком активном центре L1 активация субстратов происходит эффективнее, причем меньший субстрат, имипенем, более жестко фиксирован в активном центре по сравнению с нитроцефином. Таким образом, более эффективная активация субстрата приводит к понижению барьера стадии нуклеофильной атаки, а эффективность активации, в свою очередь, зависит от структурной жесткости активного центра.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект 18-74-10056).

### Литература

1. *Lence E., González-Bello C.* Molecular Basis of Bicyclic Boronate  $\beta$ -Lactamase Inhibitors of Ultrabroad Efficacy—Insights From Molecular Dynamics Simulation Studies // *Front. Microbiol.* 2021. V. 12: 721826.
2. *Horton L. B.* [et al.]. Mutagenesis of zinc ligand residue Cys221 reveals plasticity in the IMP-1 metallo- $\beta$ -lactamase active site // *Antimicrob Agents Chemother.* 2012. V. 56(11). P. 5667–5677.
3. *Khrenova M. G., Nemukhin A. V.* Modeling the transient kinetics of the L1 metallo- $\beta$ -lactamase // *J. Phys. Chem. B.* 2018. V. 122. P. 1378–1386.
4. *Krivitskaya A. V., Khrenova M. G.* Influence of the Active Site Flexibility on the Efficiency of Substrate Activation in the Active Sites of Bi-Zinc Metallo- $\beta$ -Lactamases // *Molecules.* 2022. V.27(20): 7031.
5. *Bebrone C.* Metallo- $\beta$ -lactamases (classification, activity, genetic organization, structure, zinc coordination) and their superfamily // *Biochem. Pharmacol.* 2007. V. 74. P. 1686–1701.
6. *Ambler R. P.* [et al.]. A standard numbering scheme for the class A beta-lactamases // *Biochem. J.* 1991. V. 276. P. 269–270.
7. *McManus-Munoz S., Crowder M. W.* Kinetic mechanism of metallo- $\beta$ -lactamase L1 from *Stenotrophomonas maltophilia* // *Biochemistry.* 1999. V. 38. P. 1547–1553.

УДК 538.931

### Моделирование диизопропилового эфира методом молекулярной динамики в различных межатомных потенциалах

*О. В. Кашури*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Диизопропиловый эфир представляет собой бесцветную жидкость, растворимую в органических растворителях; используется как промышленный растворитель и добавка к топливу, относится к классу простых эфиров. Простые эфиры могут стать ключевыми компонентами ион-селективных барьеров, представляющих собой «жидкую мембрану» [1], где слой не смешивающейся с водой органической жидкости разделяет два слоя водного раствора. Одними из наиболее интересных компонентов, которые могут обеспечивать селективность «жидкой мембраны», являются простые эфиры: краун-эфиры и криптанды. Однако по этим веществам, в отличие от диизопропилового эфира, набор экспериментальных работ достаточно невелик. Это делает диизопропиловый эфир удобным модельным веществом для отработки методов молекулярной динамики, которые затем могут быть применены для других простых эфиров, включая краун-эфиры и криптанды.

При описании работы ион-селективного барьера типа жидкой мембраны наибольшее значение имеет описание подвижности процессов в среде простого эфира и содержащих его растворов. Причем качество описания процессов переноса хорошо коррелирует с точностью описания транспортных свойств системы: вязкостью и диффузией.

Работы, посвященные молекулярно-динамическому моделированию диизопропилового эфира и его смесей с другими веществами, немногочисленны. Является открытым вопрос о наиболее подходящем для описания транспортных свойств диизопропилового эфира межатомном потенциале.

В данной работе для диизопропилового эфира применяется метод классической молекулярной динамики с использованием межатомных потенциалов GAFF, OPLS-AA/CM1A, CHARMM36 и COMPASS для расчета плотности и вязкости в диапазоне температур 273–333 К. По полученным значениям проводится сравнительная оценка использованных потенциалов. Значения плотности и вязкости сравниваются с работой [2]. Результаты по межатомным потенциалам GAFF, OPLS-AA/CM1A, CHARMM36 опубликованы в статье [3].

Для проведения моделирования использовался программный пакет GROMACS. В расчетах использовалась ячейка с 3375 молекулами. Процесс релаксации системы состоял из двух шагов: вывода системы на нужную температуру в NVT-ансамбле и затем вывод системы на нужную температуру и давление в NPT-ансамбле. Оба процесса моделировались на интервале 200 пс. Момент достижения равновесия определялся по выходу на константную зависимость температуры в случае NVT-релаксации и давления в случае NPT-релаксации.

Вначале на первом этапе моделирования для каждого потенциала рассчитывалась равновесная плотность. Было установлено, что потенциал COMPASS обеспечивает очень близкую к эксперименту [2] зависимость плотности от температуры. Максимальное различие с экспериментом на исследуемом диапазоне температур не превышает 1%. При этом остальные 3 потенциала дают значительно худшие зависимости.

Вязкость рассчитывалась методом Грина–Кубо. Моделирование проводилось в NVT-ансамбле в течение 15 нс. Затем из полученной траектории вычислялись 150 статистически независимых автокорреляционных функций, которые затем усреднялись, и по результирующей функции рассчитывалась вязкость.

На рис. 1 представлены результаты расчета вязкости с использованием всех четырех потенциалов. Потенциал COMPASS обеспечивает хорошую зависимость вязкости от температуры. Максимальное отклонение от эксперимента не превышает 8%. При этом потенциалы GAFF, OPLS-AA/CM1A и CHARMM36 описывают зависимость вязкости от температуры значительно хуже.

По результатам данной работы потенциал COMPASS показал наилучшую точность по описанию температурной зависимости плотности и вязкости среди всех рассмотренных потенциалов. Более того, рассчитанные с его помощью значения плотности и вязкости отлично согласуются с экспериментом. Это позволяет рекомендовать COMPASS для использования при исследовании методом МД-процессов переноса в диизопропиловом эфире, а также в смесях диизопропилового эфира с другими простыми эфирами.

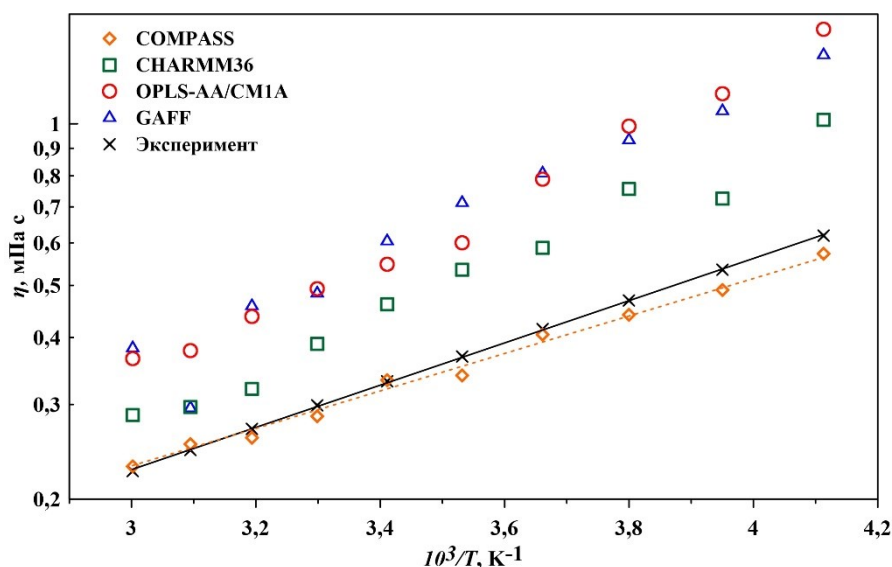


Рис. 1. Зависимость коэффициента вязкости от обратной температуры с использованием различных потенциалов

Данная работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075–02–2021–1316 от 30.09.2021). Автор благодарит Н. Кондратюка за помощь в выборе потенциалов, А. Ланкина и Г. Нормана за постановку задачи и анализ результатов.

## Литература

1. *Liu G., Zhao Z., Ghahreman A.* Novel approaches for lithium extraction from salt-lake brines: A review // *Hydrometallurgy*. 2019. V. 187. P. 81–100.
2. *Meng X., Wu J., Liu Z.* Accumulation of Itaconic, 2-Hydroxyparaconic, Itatartaric, and Malic Acids by Strains of the Genus *Ustilago* // *J. Chem. Eng.* 2009. V. 54(9). P. 2353–2358.
3. *Кашурин О.В., Кондратьев Н.Д., Ланкин А.В., Норман Г.Э.* Моделирование диизопрпилового эфира методом молекулярной динамики в различных межзатомных потенциалах // *Журн. физ. химии*. 2023. Т. 97. № 6. С. 836–842.

УДК 538.931

## Транспортные свойства монокристалла диоксида циркония

*Н. А. Касапенко*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В водородной энергетике требуются материалы для проведения высокотемпературного электролиза водяного пара, которые обладают высокой электропроводностью и стабильностью при высоких температурах [1]. Одним из таких соединений является диоксид циркония, электропроводность которого зависит от вакансий кислорода и примесей, его стабилизирующих. Исследование свойств электропроводности диоксида циркония представляет практический интерес как возможность получения составов и концентраций примесей, оптимальных для решения данной задачи.

В данной работе получена модель чистого монокристаллического диоксида циркония с помощью метода молекулярной динамики как без учета поляризации, так и с учетом поляризации ионов кристаллического остова.

Сначала рассматривается система без поляризации с потенциалом Бакингема–Кулона. Кристаллическая решетка состоит из ионов. Дальнедействующий потенциал Кулона рассчитывается с помощью PPPM. Система является электрически нейтральной.

Далее рассматривается система с поляризацией с потенциалом Бакингема–Кулона, дополненным core-shell моделью. Каждый ион представляется как тяжелое ядро и легкая оболочка, потенциал взаимодействия которых — гармонический осциллятор. При этом заряд иона разделяется между ядром и оболочкой таким образом, что суммарный заряд иона сохраняется. Дальнедействующий потенциал Кулона рассчитывается с помощью PPPM. Система является электрически нейтральной.

Для получения равновесного состояния используется NPT-ансамбль. Сначала монокристалл постепенно нагревается до температуры 5000 К под давлением 200 кбар, затем он охлаждается до требуемой температуры при нулевом давлении. Впоследствии в NVE-ансамбле для равновесной системы рассчитывается коэффициент диффузии по формуле Эйнштейна–Смолуховского. Для численного моделирования используется открытый программный пакет LAMMPS. Описанный выше алгоритм выполняется как для системы без поляризации, так и для системы с поляризацией. Далее таким же образом моделируется монокристаллический диоксид циркония, легированный иттрием.

Получены коэффициенты диффузии чистого диоксида циркония для обеих систем при различных температурах, хорошо согласующиеся со статьей [2]. Получены коэффициенты диффузии для легированного иттрием монокристалла. Получена зависимость коэффициента диффузии от концентрации примеси.

Докладчик выражает благодарность Т.М. Савилову за консультации по теме, Г.Э. Норману и А.В. Ланкину за научное руководство, помощь в освоении материала и ценные советы.

## Литература

1. *Радченко П. В.* [и др.]. Водород в энергетике: учеб. пособие. — Екатеринбург: Изд-во Уральского ун-та, 2014.
2. *Savilov T. M.* [et al.]. The effect of atomic polarization on the diffusion coefficient of oxygen ions in cubic zirconia // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021. V. 1787: 012011.
3. *Artemov S. A.* [et al.]. Effect of the ionic radius of stabilizing oxide cation on the local structure and transport properties of zirconia based solid solutions // *J. Alloys Compd.* 2021. V. 870: 159396.

## Изучение поверхностного натяжения н-нонана в модели SAFT-γ Mie

О. М. Смирнов<sup>1,2</sup>, Д. Ю. Ленеv<sup>1,2</sup>, В. В. Писарев<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

В рамках исследования была изучена точность воспроизведения коэффициента поверхностного натяжения н-нонана, который является типичным представителем жидких предельных углеводородов, в рамках модели SAFT-γ Mie. В этой модели н-нонан представлен в виде трех зерен сферической формы двух типов, соединенных в цепочку и соответствующих группам  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$  и  $\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ . Взаимодействие между двумя «зернами» происходит по обрезанному Mie-потенциалу, коэффициенты которого были определены в работе [1]. Внутримолекулярные же взаимодействия описываются гармоническими потенциалами как для энергии растяжения связей, так и для энергии углового изгиба.

Моделирование производилось методом молекулярной динамики с помощью программного пакета LAMMPS [2]. Создавалась двухфазная система, состоящая из жидкой пленки, окруженной паром, в ячейке с периодическими граничными условиями, после чего она наблюдалась в каноническом ансамбле. Для расчетов выводятся профили плотности и элементов тензора напряжений системы. Коэффициент поверхностного натяжения определяется как

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} [P_N(z) - P_T(z)] dz, \quad (1)$$

где  $P_N$  и  $P_T$  – нормальная и тангенциальная компоненты тензора давлений.

Наблюдалась зависимость коэффициента поверхностного натяжения модели SAFT-γ Mie от радиуса обрезания потенциала (рис. 1). Учет данного эффекта посредством моделирования системы при достаточно большом радиусе обрезания требует значительных вычислений. Вместо этого моделировались системы при нескольких меньших радиусах обрезания, после чего результаты аппроксимировались для прогнозирования значения коэффициента поверхностного натяжения для бесконечно больших радиусов обрезания.

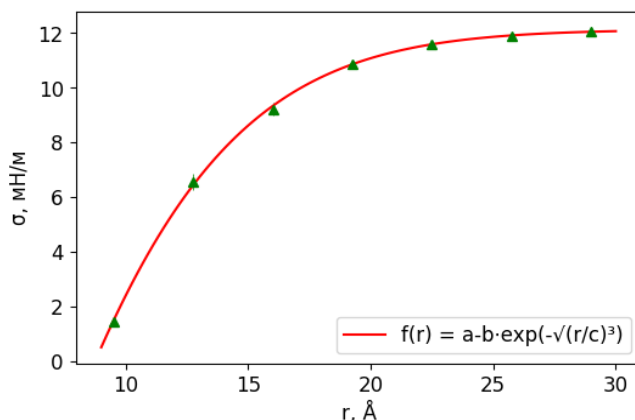


Рис. 1. Зеленым представлен график зависимости коэффициента поверхностного натяжения от радиуса обрезания, красным — аппроксимирующая функция

Вычисления продемонстрировали (рис. 2a), что в SAFT-γ Mie модели коэффициент поверхностного натяжения получался до 13% больше, чем его табличные значения при тех же температурах [3]. Также при температурах выше 470 К коэффициенты поверхностного натяжения, рассчитанные для модели SAFT-γ Mie, сошлись с табличными значениями в пределах двух величин погрешности.

Для предсказания поведения SAFT-γ Mie модели н-нонана при других температурах был определен парахор  $P_0$ . Он однозначно устанавливает связь между температурой системы, разностью плотностей жидкой и газовой фазой и коэффициентом поверхностного натяжения:

$$\sigma = \left[ \frac{P_0 \cdot R \cdot (\rho_l - \rho_v)}{M(C_9H_{20})} \right]^4, \quad (2)$$

здесь  $\rho_l$  и  $\rho_v$  — плотности жидкой и газовой фаз,  $M(C_9H_{20})$  — молярная плотность н-нонана,  $R$  — температурная поправка, предложенная в работе [4], которая определяется как

$$R = (1 - T_r)^{0.37} \cdot T_r \cdot \exp(0,30066/T_r + 0,86442 \cdot T_r^9), \quad (3)$$

а  $T_r = T/T_c$  является отношением исследуемой температуры к критической температуре н-нонана.

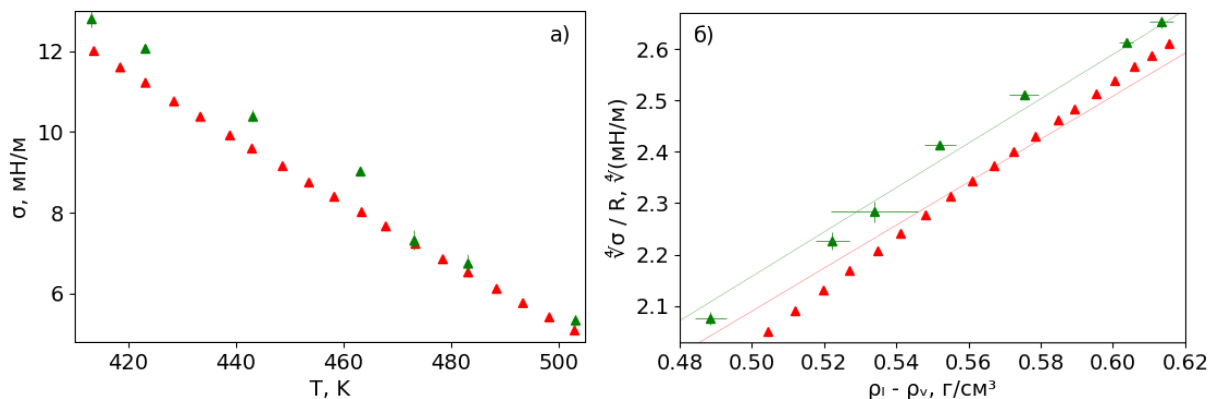


Рис. 2. Зависимости коэффициента поверхностного натяжения от температуры (а) и корня четвертой степени коэффициента поверхностного натяжения, деленного на температурную поправку от разности плотностей жидкой и газовой фаз (б). Зеленым представлены данные вычислений, красным — экспериментальные данные [3]

Как видно на рис. 2б, значения, полученные для модели SAFT- $\gamma$  Mie, в рамках погрешности сошлись с линейной зависимостью, определяемой величиной парахора. При этом у модели величина получилась до 3% больше, чем рассчитанное значение парахора на основе табличных данных.

Подводя итоги, в модели SAFT- $\gamma$  Mie н-нонана коэффициент поверхностного натяжения получился до 13% больше, чем его табличные значения при тех же температурах, и они удовлетворительно сошлись при температурах выше 470 К. Кроме того, величина парахора модели оказалась на 3% больше, чем величина, рассчитанная на основе табличных данных. Таким образом, модель дает приемлемые значения коэффициента поверхностного натяжения при высоких температурах, а при низких температурах требуется уточнение модели.

## Литература

1. *Rahman S. U.* [et al]. SAFT- $\gamma$  force field for the simulation of molecular fluids. 5. Hetero-group coarse-grained models of linear alkanes and the importance of intramolecular interactions // *J. Phys. Chem. Biophys.* 2018. V. 122(39). P. 9161–9177.
2. *Thompson A. P.* [et al.]. LAMMPS — a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // *Comput. Phys. Commun.* 2022. V. 271: 108171.
3. *Mulero A., Cachadina I., Parra M.* Recommended correlations for the surface tension of common fluids // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 2012. V. 41(4): 043105.
4. *Escobedo J., Mansoori G. A.* Surface tension prediction for pure fluids // *AIChE J.* 1996. V. 42. P. 1425–1433.

УДК 533.922

## Применение методов машинного обучения для интегрирования уравнений движения в методе молекулярной динамики

*А. Л. Варламов<sup>1</sup>, М. А. Орехов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Была предложена реализация интегрирования траекторий атомов при помощи алгоритмов машинного обучения для двух случаев: газа и кристалла. Главное преимущество данного метода заключается в том, что он дает возможность делать несколько десятков или даже сотен шагов интегрирования вдоль траектории всего за одну итерацию алгоритма. Для проверки метода был вычислен коэффициент диффузии для леннард-джонсовского газа. Подход для газа и для кристалла немного отличается. Сам алгоритм

заключается в предсказании перемещения частицы системы на основе ее признакового описания:  $\Delta s = g(X)$ , здесь  $s$  — перемещение частицы,  $X$  — ее признаковое описание,  $g$  — функция от признакового описания, которую восстанавливает алгоритм машинного обучения.

Рассмотрим общий случай для кристалла. Для построения матрицы  $X$  для  $j$ -го атома системы из  $N$  атомов необходимо выбрать некоторое отображение  $f$  в трехмерное пространство, зависящее от расстояний до всех атомов,  $f = f_{a,b}(\vec{r}_{j1}, \dots, \vec{r}_{jN})$ , которое по нашему предположению будет некоторым образом похоже на силу и параметризуется двумя настраиваемыми параметрами  $(a, b)$ . Затем необходимо выбрать  $k$  пар параметров  $(a_i, b_i)$  для построения матрицы размера  $k$ :  $\tilde{X} = VV^T$ , где

$$V = (V_1, \dots, V_k)^T, \quad (1)$$

$$V_i = f_{a_i, b_i}(\vec{r}_{j1}, \dots, \vec{r}_{jN}). \quad (2)$$

Затем к матрице  $\tilde{X}$  мы добавляем вектор скорости частицы  $\mathbf{v}$  и получаем признаковое описание для атома в кристалле, на основании которого можно делать предсказание перемещения:  $X = (\tilde{X}, \mathbf{v})$ .

Рассмотрим случай газа. Он отличается от случая кристалла тем, что для предсказания перемещения необходимо учитывать относительные скорости всех атомов, однако можно пренебречь непарными взаимодействиями. В этом случае для интегрирования системы из  $N$  частиц необходимо разбить ее на  $\frac{N(N-1)}{2}$  пар и отдельно для каждой пары производить предсказание перемещений, рассматривая их как отдельную систему. Для атома из системы из двух частиц признаковое описание  $X$  будет строиться следующим образом: так же как для кристалла, вычисляется матрица  $\tilde{X}$ , затем к ней добавляется вектор относительной скорости для данной двойки атомов и затем вектор скорости данного атома  $\mathbf{v}$ . Тогда имеем признаковое описание данного атома:  $X = (\tilde{X}, \mathbf{v}, \mathbf{v}_{\text{отн}})$ . Также можно учесть и вклад непарных взаимодействий, рассматривая все тройки, четверки частиц и т. д. и учитывая зависимость  $\Delta s$  от относительных скоростей всех атомов системы.

Для интегрирования использовались две разные модели машинного обучения: GPR и полносвязная нейронная сеть.

## Литература

1. Li Z., Kermode J.R., De Vita A. molecular dynamics with on-the-fly machine learning of quantum-mechanical forces // Phys. Rev. Lett. 2015. V. 114: 096405.
2. Kruglov I., Sergeev O., Yanilkin A. [et al.]. Energy-free machine learning force field for aluminum // Sci. Rep. 2017. V. 7: 8512.

УДК 577.352.332.

## Гетеродимерные состояния трансмембранных сегментов рецепторов DDR1 и ErbB2, предсказанные с помощью методов атомистического моделирования

Е. А. Козлов<sup>1</sup>, Р. Г. Ефремов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт биоорганической химии им. акад. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН

Рецепторные тирозинкиназы (РТК) — интегральные мембранные белки-рецепторы, отвечающие за важнейшие клеточные функции, такие как рост, развитие, дифференцировка и распространение клеток. Представителями семейства РТК являются белки DDR1 и ErbB2. Структурно они состоят из трех доменов: внеклеточного, отвечающего за связывание с лигандом, внутриклеточного, обеспечивающего фосфорилирование остатков тирозина, и трансмембранного (ТМ), способствующего передаче сигнала внутрь клетки [1]. Нарушения функционирования DDR1 и ErbB2 могут приводить к развитию фиброза, артрита и рака. Активация РТК связана с их олигомеризацией и поэтому может происходить не только при индукции лигандом, но и при изменении липидного окружения или при взаимодействии с другими РТК [2]. В частности, рецепторы подсемейства ErbB известны способностью к гетеродимеризации, оказывающей существенное влияние на их активность. Ранее было обнаружено значительное сходство аминокислотных последовательностей ТМ-доменов DDR1 и ErbB2, а также подобие распределения гидрофобных и гидрофильных областей на поверхности этих доменов. На основании этого было выдвинуто предположение о возможной гетеродимеризации ТМ-доменов DDR1 и ErbB2, способной влиять на



активность этих рецепторов. В связи со сложностью изучения мембранных белков экспериментальными методами, для предсказания структурных свойств гетеродимеров ТМ-доменов DDR1 и ErbB2 использовали методы компьютерного моделирования.

В данной работе получены возможные гетеродимерные состояния ТМ-доменов DDR1 и ErbB2, количественно оценена склонность рассматриваемых пептидов к ассоциации в липидном бислое. Выявлены взаимодействия, стабилизирующие предполагаемые структуры гетеродимеров, и предложены потенциальные способы воздействия на исследуемые белки.

Предварительные структуры гетеродимеров ТМ-сегментов DDR1 и ErbB2 были получены при помощи веб-сервиса PredDimer (<https://preddimer.nmr.ru/>). Оценку их стабильности в мембранном окружении проводили при помощи метода молекулярной динамики, реализованного в программном пакете GROMACS (<https://www.gromacs.org/>). Для количественной оценки склонности гетеродимеров к ассоциации исследовали профили свободной энергии, полученные при помощи метода Umbrella Sampling Molecular Dynamics.

Были обнаружены две стабильные в бислое пальмитоилолеоилфосфатидилхолина (ПОФХ) структуры гетеродимеров ТМ-сегментов DDR1/ErbB2. Для этих моделей были отмечены характерные гликофорин-подобные интерфейсы димеризации и большие углы скрещивания, известные для полученных ранее стабильных структур гомодимеров ТМ-доменов DDR1 и ErbB2. Для одной из полученных структур гетеродимеров оцененное значение свободной энергии ассоциации оказалось сравнимым с энергией ассоциации гомодимера ТМ-доменов ErbB2, что позволяет сделать предположение об имеющей место гетеродимеризации DDR1 и ErbB2, а также рассмотреть ТМ-домен DDR1 в качестве возможной модели для построения так называемого «пептида-перехватчика» ErbB2.

Полученная информация о гетеродимерах ТМ-доменов DDR1 и ErbB2 описывает механизм возможной олигомеризации исследуемых пептидов и позволяет на молекулярном уровне определить регулирующие активацию рецепторов взаимодействия, учет которых необходим для эффективного поиска новых способов целенаправленного воздействия на функционирование рецепторов при патологиях.

## Литература

1. *Lemmon M. A., Schlessinger J.* Cell signaling by receptor tyrosine kinases // *Cell*. 2010. V. 141(7). P. 1117–1134.
2. *Agarwal G., Smith A. W., Jones B.* Discoidin Domain Receptors: micro insights into macro assemblies // *Biochim. Biophys. Acta, Mol. Cell. Res.* 2019. V. 1866(11): 118496.

УДК 544.034

## Конформационная свобода молекулы сахарозы в водном растворе

*В. И. Дещеня<sup>1,2</sup>, Н. Д. Кондратюк<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Изучение структурных особенностей сахарозы в водном растворе важно для целого ряда практических задач. Конформация молекул и образование внутри- и межмолекулярных водородных связей определяют характеристики продукта в пищевой промышленности, а также возможность стабилизации белка в растворе, что важно для фармацевтической области. Кроме того, исследование структуры сахарозы может дать информацию о свойствах других более сложных углеводов.

Исследования строения молекулы сахарозы имеют богатую историю. Первые результаты, полученные методом рентгеновской кристаллографии, опубликованы в 1952 г. [1] и содержат положения тяжелых атомов в кристалле сахарозы. Последующие работы 1963 г. [2] и 1973 г. [3] позволили определить положения атомов водорода двумя различными методами. Однако экспериментальные исследования конформации молекулы сахарозы в водном растворе оказываются трудоемкими в связи с высокой скоростью структурных переходов.

Метод молекулярной динамики является эффективным инструментом для таких исследований, поскольку он позволяет рассчитать траектории всех атомов системы. Задача поиска подходящего потенциала межатомного взаимодействия для углеводов долгое время остается нерешенной [4]. В настоящее время существует несколько потенциалов, которые аккуратно воспроизводят взаимодействия в водных растворах моно-, ди- и полисахаридов [4–7] и позволяют проводить дальнейшие их исследования.

В данной работе используется один из таких потенциалов [7], показывающий хорошую воспроизводимость экспериментальных коэффициентов диффузии и вязкости, для исследования конформаций молекулы сахарозы в водном растворе. Сахароза является дисахаридом, состоящим из двух мономеров, соединенных гликозидной связью. Эта связь описывается двумя торсионными углами  $\Phi$  и  $\Psi$ , совместное распределение которых изучается с помощью карт Рамачандрана. В водном растворе было показано наличие нескольких устойчивых положений гликозидной связи, что согласуется с более ранними работами [8]. Показано, что наиболее стабильная конформация гликозидной связи ближе всех находится к кристаллической [1–3], что согласуется с экспериментальными данными [9].

Однако конформация молекулы сахарозы зависит не только от конформации гликозидной связи, но и от положений гидроксиметильных групп в глюкопиранозном и фруктофуранозном кольцах молекулы. Так, для одного положения гликозидной связи существует несколько устойчивых конформаций молекулы. Проанализированы переходы между ними, рассчитаны времена жизни. Кроме того, для каждой из конформаций выявлены внутримолекулярные водородные связи, стабилизирующие ее.

Расчеты проведены на суперкомпьютерах «Десмос» и «Фишер» ОИВТ РАН. Исследование выполнено в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075–02-2021–1316 от 30.09.2021). Авторы выражают благодарность Г. Э. Норману и А. В. Ланкину за постановку задач и содействие во время работы.

### Литература

1. *Beevers C. A., McDonald T. R. R., Robertson J. H., Stern F.* The crystal structure of sucrose // *Acta Crystallogr.* 1952. V. 5(45). P. 689–690.
2. *Brown G. M., Levy H. A.* Sucrose: precise determination of crystal and molecular structure by neutron diffraction // *Science.* 1963. V. 141(3584). P. 921–923.
3. *Hanson J. C., Sieker L. C., Jensen L. H.* Sucrose: X-ray refinement and comparison with neutron refinement // *Acta Crystallogr. B Struct. Sci.* 1973. V. 29, N. 4. P. 797–808.
4. *Jamali S. H., Westen T., Moulton O. A., Vlught T. J. H.* Optimizing nonbonded interactions of the OPLS force field for aqueous solutions of carbohydrates: how to capture both thermodynamics and dynamics // *J. Chem. Theory Comput.* 2018. V. 14(12). P. 6690–6700.
5. *Lay W. K., Miller M. S., Elcock A. H.* Optimizing solute–solute interactions in the GLYCAM06 and CHARMM36 carbohydrate force fields using osmotic pressure measurements // *J. Chem. Theory Comput.* 2016. V. 12(4). P. 1401–1407.
6. *Batista M. L. S., Pérez-Sánchez G., Gomes J. R. B.* [et al.]. Evaluation of the GROMOS 56A CARBO force field for the calculation of structural, volumetric, and dynamic properties of aqueous glucose systems // *J. Phys. Chem. B.* 2015. V. 119(49). P. 15310–15319.
7. *Deshchenya V. I., Kondratyuk N. D., Lankin A. V., Norman G. E.* Molecular dynamics study of sucrose aqueous solutions: From solution structure to transport coefficients // *J. Mol. Liq.* 2022. V. 367: 120456.
8. *Xia J. A.* Sucrose in aqueous solution revisited, Part 2: Adaptively biased molecular dynamics simulations and computational analysis of NMR relaxation // *Biopolymers.* 2012. V. 97(5). P. 289–302.
9. *Silva D. G. B., Hallwass F., Navarro-Vázquez A.* Single experiment measurement of residual dipolar couplings in aqueous solution using a biphasic bisperylene imide chromonic liquid crystal // *Magn. Reson. Chem.* 2021. V. 59(4). P. 408–413.

---

# Секция фундаментальных проблем физики квантовых технологий

---

Председатель: Г. Б. Лесовик (д.ф.-м.н., с. н. с., зав. лабораторией)

Зам. председателя: Д. А. Кронберг (к. ф.-м. н.)

Секретарь: С. Ю. Цовьянов

---

Дата: 04.04.2023

Время: 13:00

УДК 530.145

## Экспериментальная реализация схемы раздачи квантового ключа на сверхдальние расстояния

*А. Э. Алиев<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Работа состояла в реализации системы распределения квантового ключа на дальнюю дистанцию. Каналом передачи квантовых состояний является оптическое волокно. Распределение происходит между двумя пользователями — передающей стороной (в литературе — Алиса) и стороной приема (Боб).

Значительным преимуществом данного протокола распределения является то, что для его осуществления нет необходимости в доверенных узлах [1, 2]. Принципиальная схема протокола изображена на рис. 1.

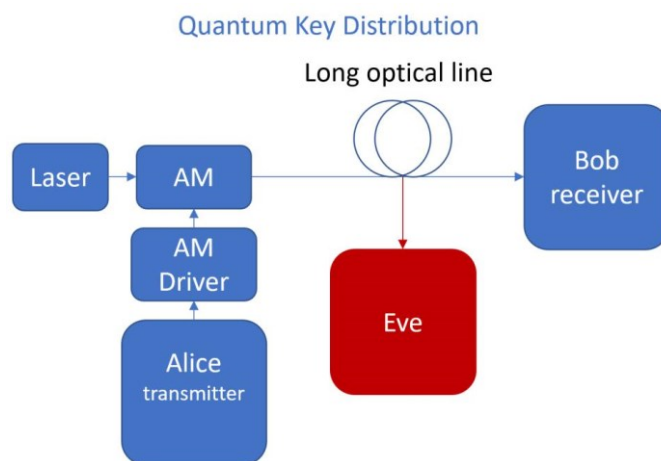


Рис. 1. Схема реализации протокола распределения квантового ключа. На схеме AM — амплитудный модулятор, Eve — перехватчик, Alice, Bob — передатчик и приемник соответственно

Ключевым элементом протокола является то, что для защиты передаваемой информации от внедрения перехватчика (Евы) осуществляется постоянный мониторинг оптической линии [2]. Мониторинг линии подразумевает два независимых измерения. Первое из них — промер линии на просвет, состоит в измерении потерь в оптической линии целиком. Второе измерение необходимое для контроля линии — рефлектометрия.

Для квантового канала связи была реализована система отправки и приема сигнала. Низкоэнергетические посылки генерируются и отправляются в линию, на выходе оптической линии сигнал обрабатывается и формируется битовая последовательность

Автономное функционирование системы реализовано при помощи микроконтроллеров. Режимы работы подразумевают под собой передачу информации, измерение общих потерь в линии, измерение

локальных потерь в линии при помощи рефлектометрии. Таким образом, достигнуты высокие скорости передачи информации и контроль линии, не допускающий внедрений и перехвата информации.

## Литература

1. Kirsanov N. S., Pastushenko V. A., Kodukhov A. D., Yarovikov M. V., Sagingalieva A. B., Kronberg D. A., Pflitsch M., Vinokur V. M. Forty thousand kilometers under quantum protection // *Sci. Rep.* V. 13(1): 8756.
2. Kirsanov N. S., Kenbaev N. R., Sagingalieva A. B., Kronberg D. A., Vinokur V. M., Lesovik G. B. Long-distance quantum key distribution based on the physical loss control // *arXiv preprint*. [2021]. arXiv: 2105.00035v1.

УДК 530.145

## Оценка наблюдаемой с помощью квантовой памяти

Л. А. Маркович<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Российский квантовый центр

<sup>2</sup>Институт проблем передачи информации им. А. А. Харкевича РАН

Шумные квантовые устройства промежуточного масштаба (NISQ) с сотнями кубитов экспериментально реализованы на базе сверхпроводящего оборудования [1], нейтральных атомов [2] и ионных ловушек. Достижения в этой области стимулировали интерес к моделированию систем многих тел, таких как электронные структуры молекул, изучению неравновесной квантовой статистической механики и решению задач комбинаторной оптимизации на NISQ-устройствах. Оценка средних значений многокубитных наблюдаемых, например энергии системы, является важной задачей для перечисленных приложений. Их прямая оценка может быть весьма нетривиальной; например, для фермионных наблюдаемых, моделируемых на системах кубитов [3], она представляет серьезную проблему для NISQ-устройств из-за большой глубины схемы измерения и размера выборки (общего количества измерений для требуемой точности оценки). Одним из подходов к оценке наблюдаемой с минимальной выборкой является алгоритм квантовой фазовой оценки (QPE). Для его реализации с высокой точностью требуются системы кубитов с низким уровнем шума и большим временем когерентности, поскольку глубина схемы измерения обратно пропорциональна желаемой точности. Это выводит его за рамки реализуемых на NISQ методов. Альтернативный подход — квантовая оценка энергии (QEE) — основан на разложении наблюдаемой на взвешенную сумму  $N$  многокубитных строк Паули. QEE имеет минимальную глубину измерительной схемы, но требуемая выборка заметно увеличивается из-за накопления дробового шума в процессе оценки. Так, математические ожидания строк Паули оцениваются независимо, а наблюдаемая затем рассчитывается как их линейная комбинация. Таким образом, чтобы оценить наблюдаемую, состоящую из  $N$  строк Паули, с точностью  $t$ , каждая строка Паули должна оцениваться с точностью  $O(t/N)$ , в результате чего общая сложность выборки масштабируется как  $O(t^2)$ . Накопление шума налагает существенные ограничения, поскольку количество измерений в конечном итоге ограничено доступным временем работы устройства. Часто сам процесс измерения является одной из самых трудоемких операций в современных квантовых устройствах.

Чтобы предотвратить накопление дробового шума, в недавних работах рассматривались промежуточные подходы между QPE и QEE для повышения точности оценки отдельных строк Паули и методы их группировки в коммутирующие наборы для уменьшения сложности выборки. Хотя оба подхода потенциально уменьшают общую сложность выборки, ни один из них не улучшает фундаментальное масштабирование накопления шума с количеством строк Паули.

Мы предлагаем новый подход, названный когерентным суммированием Паули (КСП), который предотвращает накопление дробового шума за счет использования квантовой памяти с одним кубитом. КСП позволяет проводить прямое измерение наблюдаемой путем оценки фазы кубита памяти в конце протокола. Таким образом предотвращается накопление дробового шума, возникающего при суммировании индивидуально оцененных средних значений строк Паули в QEE. Важно отметить, что это достигается с глубиной схемы измерения, масштабируемой логарифмически с требуемой точностью оценки, в отличие от линейного масштабирования алгоритма QPE.

Важной особенностью нашего метода является использование квантовой обработки сигналов (QSP) [4] для кодирования среднего значения строк Паули в фазе квантовой памяти с одним кубитом. Отсутствие накопления дробового шума приводит к выигрышу в дисперсии оценки по сравнению с QEE  $O(1/N)$ . Этот выигрыш можно понимать как гейзенберговское масштабирование дисперсии, в отличие от

стандартного квантового предела масштабирования в QEE. Необходимое время когерентности одного кубита памяти линейно масштабируется с  $N$ , в то время как требуемое время когерентности устройства NISQ увеличивается только логарифмически с требуемой точностью.

Таким образом, наш метод демонстрирует возможность существенного повышения производительности крупных NISQ-устройств при использовании модулей памяти всего на одном кубите с большим временем когерентности. Хотя КСП подходит для оценки любых наблюдаемых, мы полагаем, что метод будет актуален для объединения со многими алгоритмами NISQ, например для вариационного квантового решателя (VQE), где наблюдаемой является энергия системы; в частности, для оценки энергий молекул, когда преобразование фермионной системы в кубитную систему приводит к появлению сильно нелокальных переменных и представлению в терминах строк Паули большой размерности. Для реализации нашего метода наиболее всего подойдут платформы с естественными многомерными управляемыми гейтами, например атомы Ридберга.

Исследование выполнено при поддержке Дорожной карты развития квантовых технологий в Российской Федерации, договор № 868-1.3-15/15-2021 от 05.10.2021.

### Литература

1. *Jurcevic P.* [et al.]. Demonstration of quantum volume 64 on a superconducting quantum computing system // *Quantum Sci. Technol.* 2021. V. 6(2): 025020.
2. *Henriet L.* [et al.]. Quantum computing with neutral atoms // *Quantum.* 2020. V. 4: 327.
3. *McArdle S.* [et al.]. Quantum computational chemistry // *Rev. Mod. Phys.* 2020. V. 92: 015003.
4. *Low G.H., Chuang I.L.* Optimal hamiltonian simulation by quantum signal processing // *Phys. Rev. Lett.* 2017. V. 118: 010501.

УДК 004.056.53

## Удаленная аутентификация пользователей ВОЛС с помощью уникального волоконного паспорта

*А. С. Смирнов*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В работе показана возможность использования уникальных неоднородностей внутренней структуры волоконно-оптического световода для проведения удаленной аутентификации пользователей волоконно-оптических линий связи (ВОЛС).

В основе метода лежит использование оптической рефлектометрии во временной области (OTDR [1]). Рефлектометр посылает в оптическое волокно зондирующие световые импульсы с заданными параметрами. Далее он принимает и усредняет обратно рассеянное излучение, обусловленное рэлеевским рассеянием, происходящим на неоднородностях показателя преломления материала волокна. При этом даже у стандартного телекоммуникационного волокна имеются неповторимые флуктуации показателя преломления, обусловленные технологическими особенностями его производства. Как следствие, рефлектограммы участков оптического волокна оказываются уникальны, т. е. обратно рассеянный отклик имеет невоспроизводимые паттерны. На рис. 1 изображен пример таких паттернов, полученных при двух последовательных измерениях участка стандартного одномодового волокна SMF-28e (ITU-T G.652.D) длиной 1 км. Измерения проводились на длине волны  $\lambda = 1550$  нм с импульсами длительностью 500 нс и усреднением по  $2^{10}$  импульсам. При этом из рефлектограмм для удобства был вычтен линейный тренд.

Также в работе было экспериментально проверено, что различные участки оптического волокна дают абсолютно разные паттерны. Точно так же разные паттерны получаются при зондировании волокна импульсами, имеющими различные длительности. Для сравнения паттернов использовался корреляционный подход. На рис. 2 приведены соответствующие матрицы корреляций.

Кроме того, было экспериментально проверено, что структура каждого из паттернов сохраняется со временем даже при проведении измерений с разницей в неделю. Все это говорит о том, что паттерны физически уникальны и воспроизводимы, а значит, являются физически неклонированной функцией (PUF [2]). Это позволяет использовать их в качестве «рефлектоключей» — уникальных объектов, позволяющих провести аутентификацию легитимных пользователей ВОЛС.

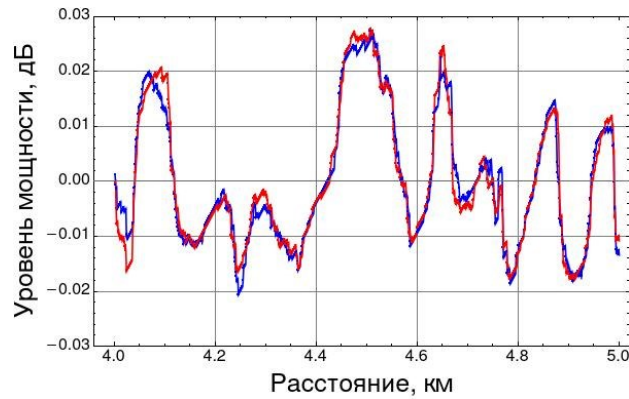


Рис. 1. Пример паттернов обратно рассеянного излучения, получающихся после математической обработки OTDR рефлектограмм. Кривые соответствуют измерениям с разницей во времени около 10 с

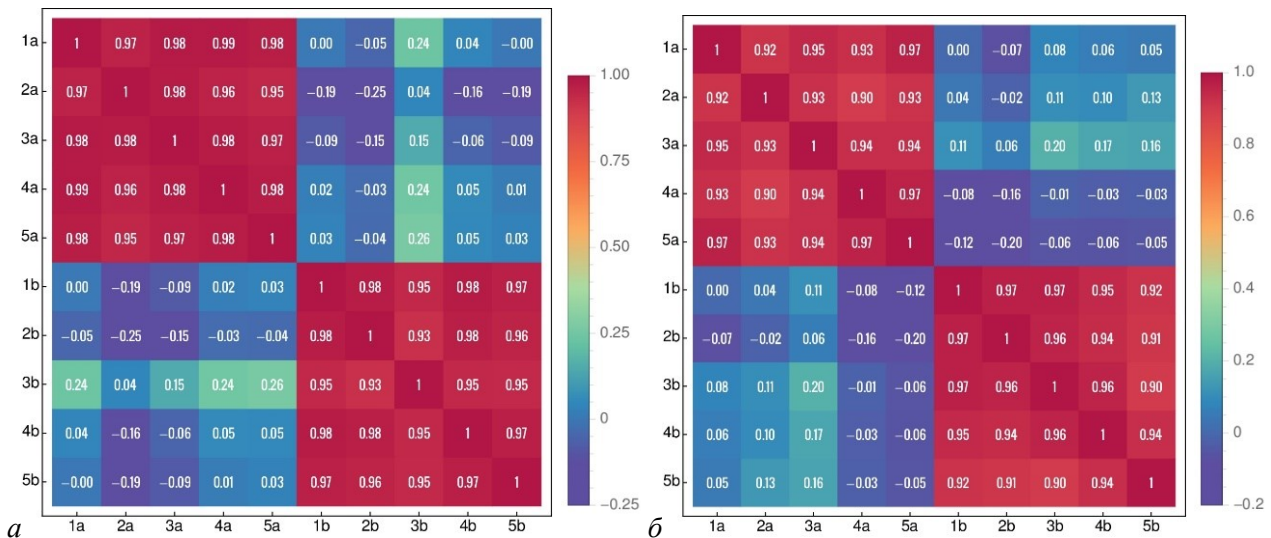


Рис. 2. Экспериментальное подтверждение уникальности паттернов: *a* — совместная корреляционная матрица для двух серий по 5 измерений двух отрезков стандартного одномодового волокна SMF-28e (ITU-T G.652.D) длиной 100 м каждый, ближайший участок находится в 20 км от рефлектометра (измерения проводились на длине волны  $\lambda=1550$  нм с длительностью импульса 500 нс и усреднением  $2^{10}$ ; серия «а» соответствует первому участку волокна, серия «б» — второму); *б* — совместная корреляционная матрица для двух серий по 5 измерений участка волокна длиной 100 м, удаленного от рефлектометра на 20 км (измерения проводились на длине волны  $\lambda=1550$  нм с усреднением  $2^{10}$ , но с разной длительностью импульса; серия «а» соответствует длительности 500 нс, а серия «б» — длительности 1000 нс)

В работе был предложен алгоритм аутентификации на примере двух пользователей: Алисы и Боба. В рамках предложенного подхода каждый из пользователей подключает свой собственный уникальный участок оптоволокну к своему концу волоконной линии. Паттерны, полученные после обработки собеседником рефлектограммы соответствующего участка, считаются уникальным откликом, определяющим успех аутентификации. Более того, каждый пользователь может дополнительно, по своему желанию, аутентифицировать любой из участков самой оптоволоконной линии аналогичным способом.

### Литература

1. Barnoski M. K., Rourke M. D., Jensen S. M., Melville R. T. Optical time domain reflectometer // Appl. Opt. 1977. V. 16. P. 2375–2379.
2. McGrath T., Bagei I. E., Wang Z. M., Roedig U., Young R. J. A puf taxonomy // Appl. Phys. Rev. 2019. V. 6: 011303.

## Сцепленность как ресурс для когерентности ансамбля и информации о путях

А. Д. Кодухов

Математический институт им. В. А. Стеклова РАН

С начала двадцатого века эксперимент Юнга с двумя щелями использовался как инструмент для наблюдения либо волновых, либо корпускулярных свойств света. Исходно свет, генерируемый источником, проходит через две разные щели и попадает на экран. Оптический путь определяется щелью, и в зависимости от разницы длин оптических путей могут наблюдаться яркие и темные пятна (интерференция). Принцип корпускулярно-волнового дуализма подразумевал, что знание пути фотона полностью исключает интерференцию на экране. В 1979 г. Wootters и Zurek [1] показали, что дуализм не обязательно должен представлять собой абсолютную несовместимость: он потенциально допускает одновременное исчезновение интерференционной видности (или когерентности) и предсказуемости — через какую щель пройдет фотон. Затем, следуя работам Greenberger и YaSin [2] и Jaeger и др. [3], Engler [4] ввел в рассмотрение детектор пути, чтобы связать видность, информацию о пути и предсказуемость. В работах [5, 6] результаты были обобщены на произвольное число щелей. В контексте классической оптики Eberly и др. [7, 8] рассматривают меру сцепленности между детектором пути и состоянием света и экспериментально подтверждают соотношение тройственности, связывающее сцепленность, предсказуемость и видность в двухщелевом интерференционном эксперименте. Qureshi [9] расширяет эти идеи на «уровень одиночных фотонов».

Все предыдущие исследования концентрировались на когерентности среднего состояния фотона в конкретном базисе. Для одиночных квантовых состояний разработана формальная ресурсная теория когерентности [10, 11], которая находит применение в квантовых алгоритмах, квантовой термодинамике, метрологии и других областях. Тем не менее теория требует расширения для работы с ансамблями квантовых состояний. Таким образом, в настоящей работе мы расширяем парадигму Энглера, рассматривая наиболее общие измерения фотонов и исследуя недавно введенную независимую от базиса когерентность ансамбля [12] в контексте энтропийных соотношений неопределенностей.

Мы рассматриваем частичное измерение сцепленного состояния как подход к созданию ансамблей квантовых состояний. Наблюдаемая, применяемая к первой подсистеме двучастичного сцепленного состояния, генерирует ансамбль во второй подсистеме. Мера сцепленности определяет начальное состояние, а наблюдаемая характеризуется своей неопределенностью — величиной, полученной из энтропийных соотношений неопределенности [13], адаптированных для одной наблюдаемой [14]. Предложенную когерентность ансамбля можно интерпретировать как когерентность состояния детектора пути в описанном выше физически мотивированном подходе. Основная цель разрабатываемой теории — установить связи между основными понятиями квантовой теории информации: когерентность, сцепленность и неопределенность наблюдаемых.

### Литература

1. Wootters W. K., Zurek W. H. Complementarity in the double-slit experiment: Quantum nonseparability and a quantitative statement of bohr's principle // Phys. Rev. D. 1979. V. 19(2). P. 473–484.
2. Greenberger D. M., Yasin A. Simultaneous wave and particle knowledge in a neutron interferometer // Phys. Let. A. 1988. V. 128(8). P. 391–394.
3. Jaeger G., Shimony A., Vaidman L. Two interferometric complementarities // Phys. Rev. A. 1995. V. 51(1): 54.
4. Englert B. G. Fringe visibility and which-way information: An inequality // Phys. Rev. Let. 1996. V. 7(11). P. 2154–2157.
5. Bagan E., Bergou J. A., Cottrell S., Hillery M. Relations between coherence and path information // Phys. Rev. Let. 2016. V. 116(16): 160406.
6. Bagan E., Bergou J. A., Hillery M. Wave-particle-duality relations based on entropic bounds for which-way information // Phys. Rev. A. 2020. V. 102(2): 022224.
7. Eberly J. H., Qian X. F., Vamivakas A. N. Polarization coherence theorem // Optica. 2017. V. 4(9). P. 1113–1114.
8. Qian X. F., Vamivakas A. N., Eberly J. H. Entanglement limits duality and vice versa // Optica. 2018. V. 5(8). P. 942–947.
9. Qureshi T. Predictability, distinguishability, and entanglement // Opt. Let. 2021. V. 46(3). P. 492–495.
10. Baumgratz T., Cramer M., Plenio M. B. Quantifying coherence // Phys. Rev. Let. 2014. V. 113(14): 140401.
11. Streltsov A., Adesso G., Plenio M. B. Colloquium: Quantum coherence as a resource // Rev. Mod. Phys. 2017. V. 89(4): 041003.

12. *Kronberg D. A.* Coherence of quantum ensemble as a dual to uncertainty for a single observable // *Lobachevskii J. Mathem.* 2019. V. 40(10). P. 1507–1515.
13. *Coles P. J., Berta M., Tomamichel M., Wehner S.* Entropic uncertainty relations and their applications // *Rev. Mod. Phys.* 20178. V. 89(1): 015002.
14. *Krishna M., Parthasarathy K. R.* An entropic uncertainty principle for quantum measurements // *Indian J. Stat. Ser. A.* 2002. P. 842–851.

UDC 535.016

## Reducing laser phase noise for enhanced fidelity in Rydberg gates

*N. Kour*<sup>1,2</sup>, *D. Svirsky*<sup>2,3</sup>, *E. Lomov*<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Moscow Institute of Physics and Technology

<sup>2</sup>Russian Quantum Center

<sup>3</sup>Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University

Quantum computing holds the potential to solve complex computational problems that classical methods are incapable of resolving [1]. However, a substantial number of logical qubits are needed for the actual implementation of quantum algorithms, and this necessitates a large improvement in quantum gate fidelities. Single atoms in optical traps are one of the promising platforms for quantum computing. This system has long coherence times, high-fidelity single qubit gates, and beyond nearest neighbors' connectivity.

Most proposals for high-fidelity two-qubit gates for neutral atoms rely on strong interaction in highly excited Rydberg states. The excitation is typically achieved through the use of laser light. However, the presence of laser noise greatly impacts the quality, reducing efficiency and accuracy of coherent optical excitation of single atoms to Rydberg states. The noise arises due to instabilities in the laser source, phase drifts in the optical path, and technical limitations in the laser control and stabilization systems [2]. In order to minimize the effect of laser phase noise and improve the coherence of Rydberg excitation, we propose to use high-finesse filtering cavities.

We discuss a design and perform a preliminary test of a tunable filter cavity to explore the impact of finite phase noise in excitation lasers on the damping of oscillations in a Rydberg atom system. The experimental setup uses two extended-cavity diode lasers and locks the phases using the Pound-Drever-Hall technique [2]. We have performed simulations to validate our estimate of the phase noise and its effect on the system, which gives us the finesse of 30,000 approximately. The cavity parameters are characterized by cavity ringdown spectroscopy and compared to a numerical model taking into account diffraction and scattering losses.

### Literature

1. *Brun T. A.* Quantum Computing // E. Blum, A. Aho (eds.) Computer Science. — New York: Springer, 2011. DOI: 10.1007/978-1-4614-1168-0\_14.
2. *De Leseleuc S., Barredo D., Lienhard V., Browaeys A., Lahaye T.* Analysis of imperfections in the coherent optical excitation of single atoms to Rydberg states // *Phys. Rev. A.* 2018. V. 97(5): 053803. DOI: 1103/PhysRevA.97.053803.

УДК 530.145.3

## Непрерывные квантовые блуждания по графу Клебша

*Т. Б. Фахрутдинов*<sup>1</sup>, *Л. Е. Федичкин*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физико-технологический институт им. К. А. Валиева РАН

Квантовые блуждания являются обобщением классических, при этом квантовая динамика позволяет частицам распространяться линейно по времени, что качественно отличает ее от классической. Это открывает возможности для реализации эффективных квантовых алгоритмов, в частности алгоритма Гровера [1].

Изучая квантовые блуждания, рассматривают модели как с дискретным, так и с непрерывным временем, в которых частица совершает переходы между связанными узлами некоторого графа. В данной работе при рассмотрении непрерывных квантовых блужданий по графу Клебша найдена точная динамика



системы в случае унитарной эволюции, а также приближенные аналитические решения в случаях слабой и сильной декогеренции в модели Гурвица [2]. Получены оценки точности приближенных решений для произвольного графа при использовании методов, изложенных в [3] и примененных в данной работе. Приведенные в работе общие оценки могут быть использованы как при численных, так и при аналитических расчетах динамики частицы в требуемом графе.

Граф Клебша может быть представлен как множество вершин четырехмерного куба со стандартными ребрами и диагоналями. Базис образуют 16 состояний, при которых частица локализована в одном из узлов графа. Их удобно нумеровать четырехбитными кодами или соответствующими десятичными числами. Узлы графа могут быть совпадающими, связанными или лежащими друг от друга на расстоянии двух ребер.

Унитарная эволюция описывается уравнением Шредингера с гамильтонианом:

$$\hat{H} = \hbar\omega \sum_{m,n=0}^{15} A_{mn} |m\rangle\langle n|, \quad (1)$$

где  $A$  — матрица смежности графа,  $\omega$  — характерная частота перехода частицы между узлами [4].

Для произвольного чистого начального состояния было найдено точное решение этого уравнения. Это решение очевидным образом обобщено на случай смешанного начального состояния. Характерной особенностью унитарной эволюции является периодичность движения частицы.

Квантовые блуждания при наличии декогеренции в модели Гурвица, принимающей во внимание измерение состояний, описываются уравнением

$$\frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{15} (H_{mk} \rho_{kn} - \rho_{mk} H_{kn}) - \Gamma(1 - \delta_{mn}) \rho_{mn}, \quad (2)$$

где  $\Gamma > 0$  — параметр, характеризующий декогеренцию [5]. Удобно использовать безразмерный параметр  $\gamma = \omega^{-1}\Gamma$ . Нас интересовали начальные условия, при которых частица локализована в некотором узле. Без ограничения общности  $\rho_{mn}(0) = \delta_{m0}\delta_{n0}$ . Рассматривались случаи сильной и слабой декогеренции.

В случае слабой декогеренции, когда  $\gamma \ll 1$ , было доказано существование собственного базиса для матрицы системы уравнений на элементы матрицы плотности. Таким образом, решение можно представить как

$$\rho_{mn}(t) = \sum_{k=1}^{256} f_{mn}^{(k)} e^{\lambda_k t}. \quad (3)$$

Динамику системы характеризует приближенное решение, в котором  $\lambda_k$  находятся с точностью до  $\omega \cdot o(\gamma)$ , а  $f_{mn}^{(k)}$  — до  $O(\gamma)$ . Оно отражает затухание всех слагаемых, за исключением диагональной матрицы с равными элементами, за время, обратно пропорциональное  $\Gamma$ , и определяется с точностью до  $e^{-\alpha\Gamma t} \cdot O(\gamma)$ ,  $\alpha > 0$ . Для графа Клебша с заданной точностью было найдено 10 различных собственных значений матрицы системы уравнений на элементы матрицы плотности; взяв проекции начального состояния на 10 соответствующих подпространств, мы пришли к требуемому аналитическому решению.

В случае сильной декогеренции, когда  $\gamma \gg 1$ , мы задались целью найти приближенное решение  $\rho_{mn}(t)$  с точностью  $\|\rho_{mn}(t) - \rho_{mn}^{(0)}(t)\| = O(\gamma^{-2})$ ,  $\|\dot{\rho}_{mn}(t) - \dot{\rho}_{mn}^{(0)}(t)\| = \omega \cdot O(\gamma^{-1})$ , где  $\rho_{mn}^{(0)}$  — точное решение. Было доказано, что для произвольного, в том числе взвешенного графа,  $\rho_{ij}(t) = O(\gamma^{-s})$ ,  $\dot{\rho}_{ij}(t) = \omega \cdot O(\gamma^{-(s-1)})$ , когда  $s$  — минимальное число ребер между узлами с номерами  $i$  и  $j$ . Показано, что если в уравнении (2) пренебречь слагаемыми, превышающими заданную точность, то решение полученного уравнения будет соответствовать решению исходного в пределах заданной точности. В соответствии с этим все недиагональные элементы матрицы плотности, соответствующие не связанным друг с другом узлам, мы положили равными нулю. После отождествления всех эквивалентных узлов была получена упрощенная система линейных уравнений 5-го порядка, решив которую в рамках заданной точности, мы получили искомое приближенное решение исходной задачи. Оно показывает, что время, за которое частица покидает исходный узел и становится классически равномерно распределенной по всем

узлам графа, пропорционально  $\Gamma$ . Поскольку в рассматриваемой модели декогеренция связана с измерениями, это есть не что иное, как проявление хорошо известного эффекта Зенона.

Приведенные нами общие оценки точности получаемых таким методом решений нельзя усилить, о чем свидетельствуют расчеты для графа Клебша. Однако в отдельных случаях, например для кольцевого графа, этот способ позволяет получить и более точные решения [3]. Существенное упрощение уравнения (2) в случае сильной декогеренции с учетом гарантированной точности получаемых решений может быть полезно, в частности при численных решениях для высокоразмерных систем.

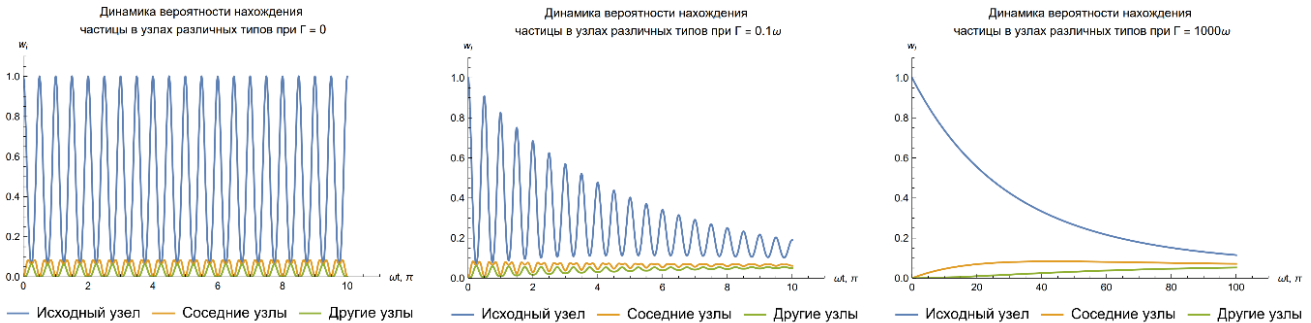


Рис. 1. Графики вероятности нахождения частицы в узлах различных типов: исходном, в котором частица находилась в нулевой момент времени, каком-либо узле, связанном с исходным, и каком-либо узле, не связанном с исходным, с течением времени при унитарной эволюции, слабой и сильной декогеренции соответственно

### Литература

1. *Shenvi N., Kempe J., Whaley K. B.* Quantum random-walk search algorithm // *Phys. Rev. A.* 2003. V. 67: 052307.
2. *Gurvitz S. A., Fedichkin L., Mozysky D., Berman G. P.* Relaxation and Zeno effect in qubit measurements // *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 91: 066801.
3. *Fedichkin L., Solenov D., Tamon C.* Mixing and decoherence in continuous-time quantum walk on cycles // *Quantum Inf. Comput.* 2006. V. 6. P. 263–276.
4. *Madhu A. K., Melnikov A. A., Fedichkin L., Alodjants A., Lee R.* Quantum walk processes in quantum devices // *Heliyon.* 2023. V. 9(3): e13416.
5. *Solenov D., Fedichkin L.* Continuous-time quantum walks on a cycle graph // *Phys. Rev. A.* 2006. V. 73: 012313.

УДК 530.145

## Улучшение квантового решения оптимизационных задач с использованием классических алгоритмов

**Б. У. Нуриев**

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Квантовые алгоритмы вполне успешно применяются для решения некоторых задач дискретной оптимизации, но имеют ряд недостатков — есть ограничения на постановку задачи, решатель может найти не оптимальное решение и т. д. При этом имеются несколько хорошо зарекомендовавших себя и проверенных десятилетиями решателей, использующих классические алгоритмы дискретной оптимизации. Можно улучшить решение задачи, используя сразу два подхода — классический и квантовый.

Предположим, у нас есть линейная или квадратичная задача бинарной оптимизации, где  $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  — вектор решения. Квантовый решатель решает задачи в QUBO-формате:

$$y = x^T Q x \rightarrow \min, \quad (1)$$

где  $Q$  — верхнетреугольная матрица констант. Если мы имеем дело с задачей с ограничением, к примеру  $Cx = D$ , то QUBO-формулировка задачи примет вид

$$y = x^T Q x + A(Cx - D)^T (Cx - D) \rightarrow \min, \quad (2)$$

где  $A$  — коэффициент штрафа, отвечающий за строгость соблюдения ограничения. Это очень важный параметр при решении задач с ограничениями; он определяет, является ли решение осуществимым.

Нужно преобразовывать задачи в этот формат. Сама задача декомпозируется классическим методом, мы используем понятие глубины — параметр, который показывает, как задача декомпозируется.

Были проведены эксперименты этой схемы решения на задаче MaxCut (задача о максимальном разрезе графа). В качестве квантовых решателей использовались Simulated annealing, D-Wave Quantum Annealing и QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm). Как мы видим на рис. 1, проблему максимального разреза графа SA и Hybrid Dwave решают очень эффективно. При любой глубине гибридный решатель почти всегда находит оптимальное решение, и даже сам SA может найти оптимальное решение.

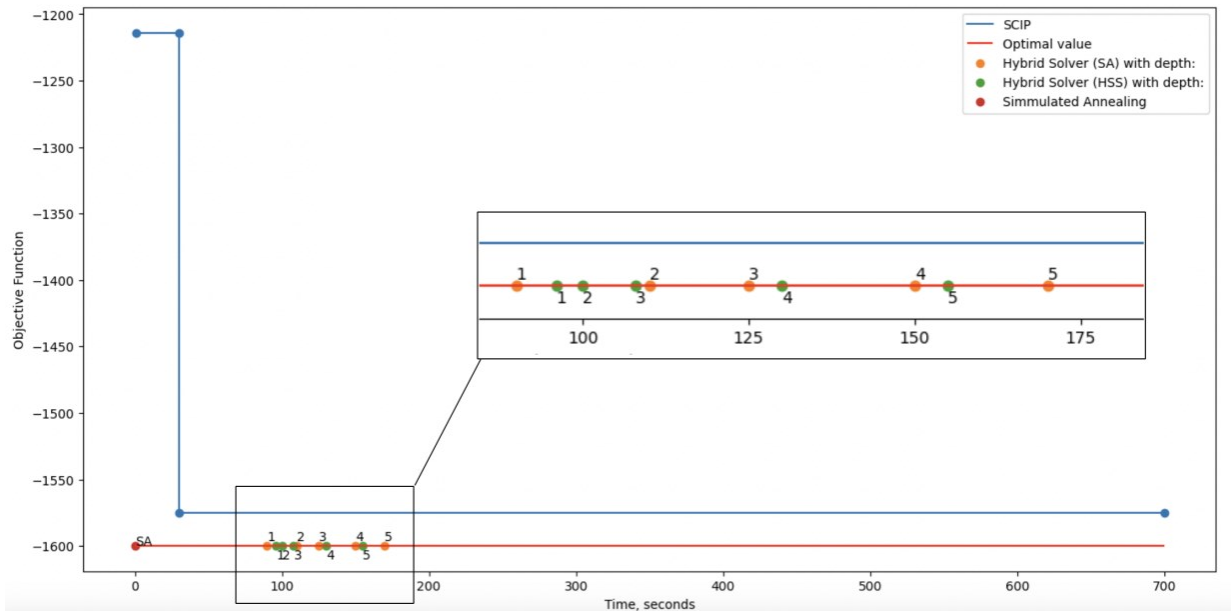


Рис. 1. Сравнение SCIP [1], SA, Hybrid classic+SA и Hybrid classic+HSS для MaxCut с 202 переменными

Как мы видим на рис. 2, для QAOA в гибридной схеме дисперсия уменьшается с увеличением глубины, но время решения быстро увеличивается. Тем не менее на глубине 6 получено хорошее решение.

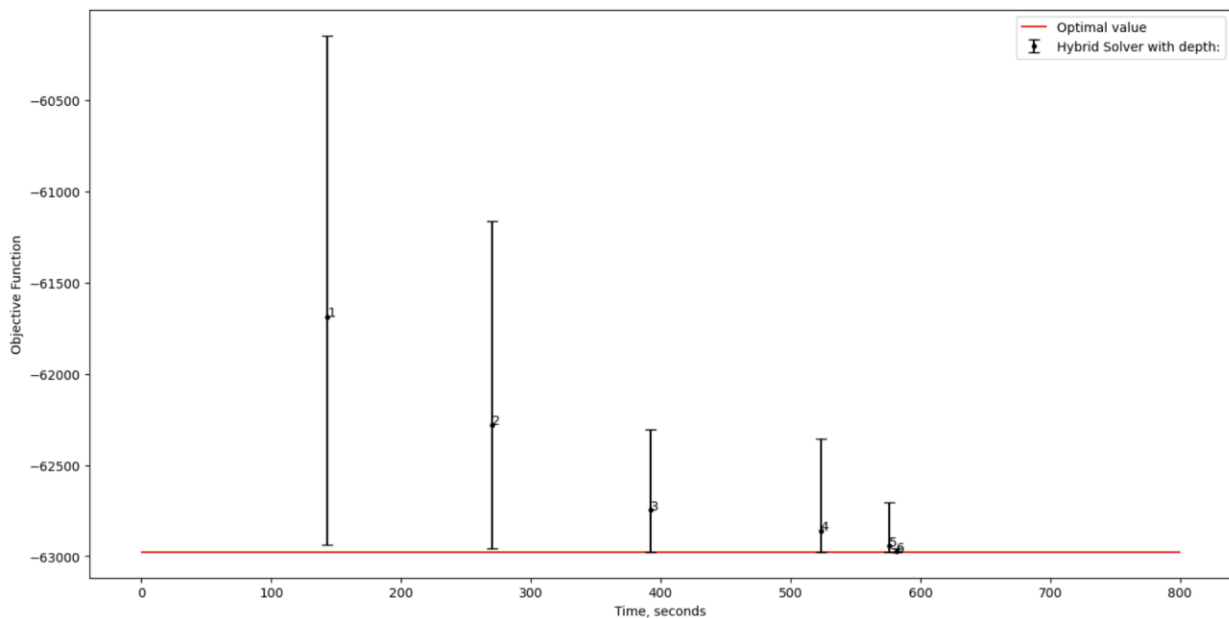


Рис. 2. QAOA в вычислительной схеме для MaxCut с 16 переменными

Таким образом, предложенная схема вычислений весьма успешно работает и может реализовываться и на других задачах.

### Литература

1. Achterberg T. Scip: solving constraint integer programs // Math. Program. Comput. 2009. V. 1(1). P. 1– 41.

## Разработка управления экспериментом по раздаче квантового ключа на высоких скоростях при помощи микроконтроллеров и ПЛИС

*Д. В. Стрижак*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В научных и промышленных экспериментах часто возникает необходимость реализовывать специфические схемы, одним из вариантов подстроиться под эксперимент является программируемая логическая интегральная схема (ПЛИС/FPGA). Это очень разносторонняя технология, содержащая большой набор логических элементов и позволяющая конфигурировать их большим количеством способов. При этом программирование FPGA оказывается похожим на разработку электрической схемы, а не программы [1].

На структурах FPGA достаточно легко реализовать распараллеливание операций, что позволяет получить большую скорость и объем обрабатываемых данных по сравнению с обычными цифровыми процессорами. Такие интегральные схемы способны эффективно выполнять узкоспециализированные задачи, с которыми не способны быстро справиться процессоры и видеокарты, из-за чего FPGA быстро набирает популярность.

Нами была разработана система кодирования и передачи дискретных сигналов «0» и «1» длительностью порядка наносекунд в оптические сигналы с помощью FPGA. В основе передатчика использован блок MicroBlaze, для модуляции электрического сигнала был подключен цифро-аналоговый преобразователь (ЦАП), а для преобразования сигнала в оптический — электрооптический амплитудный модулятор Маха–Цендера на основе ниобата лития.

Были достигнуты скорости передачи порядка 40 Мб/с. Так как рабочая точка амплитудного модулятора испытывает медленный дрейф с течением времени, необходима своевременная коррекция подаваемого на него напряжения. Для этого также на FPGA был реализован алгоритм автоматической подстройки рабочей точки путем подключения дополнительного аналого-цифрового преобразователя [2].

Таким образом, была реализована передача от ПЛИС в оптическую линию с помощью цифро-аналогового преобразователя и амплитудного модулятора. Отличительной особенностью данной системы является длина элементов битовой последовательности — порядка наносекунд, что позволяет использовать такого рода передатчики для распределения квантового ключа на большие дистанции [3].

### Литература

1. *Monmasson E., Cirstea M.N.* FPGA Design Methodology for Industrial Control Systems—A Review // IEEE Transactions on Industrial Electronics. 2007. V. 54(4). P. 1824–1842. DOI: 10.1109/TIE.2007.898281.
2. *Афанасьев В. М., Пономарев Р. С.* Электрооптические амплитудные модуляторы Маха–Цендера на основе ниобата лития, их модификации и форматы модуляции // Прикладная фотоника. 2018. С. 336–360. DOI: 10.15593/2411-4367/2017.04.08.
3. *Kirsanov N., Pastushenko V., Kodukhov A.* [et al.]. Forty Thousand Kilometers Under Quantum Protection // Sci. Rep. 2023. V. 13(1): 8756.

## Исследование декогеренции в полупроводниковых двухточечных наноструктурах

*А. Е. Бердашкевич<sup>1</sup>, Л. Е. Федичкин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физико-технологический институт имени К. А. Валиева РАН

Квантовые устройства, основанные на твердотельных наноструктурах, считаются кандидатами для крупномасштабных квантовых вычислений. Одним из вариантов реализации является конструкция, в которой квантовая информация кодируется в пространственные степени свободы электронов, помещенных в квантовую точку. Двухточечные системы в полупроводниках могут быть относительно хорошо защищены от процессов декогеренции благодаря взаимодействию с фоновой средой и электромагнитными полями [1].

Мы рассматриваем структуру в кремнии, которая состоит из двух квантовых точек, соединенных друг с другом через туннельный барьер, и одиночного электрона, перемещающегося от одной точки к

другой и обратно, как показано на рис. 1. Мы ограничиваем наше рассмотрение структурами с двумя точками, в которых энергия, необходимая для передачи на верхние уровни, намного выше, чем температура решетки и энергетическое расстояние между базовыми уровнями двух точек. Соответственно, мы учитываем только основные энергетические уровни каждой точки.

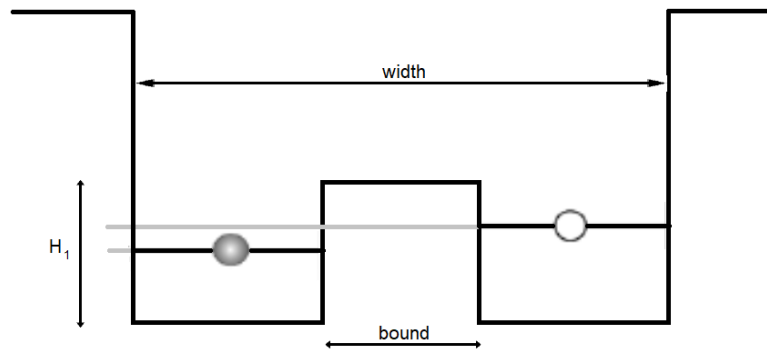


Рис. 1. Одиночный электрон в пределах потенциала с двумя ямами

Чтобы оценить когерентность кубита, сначала необходимо оценить скорость релаксационных процессов, связанных с обменом энергией. Интенсивность излучения фотона с заданной поляризацией определяется как произведение энергии кванта на вероятность излучения в единицу времени:

$$J(\omega_{ab}) = \frac{4}{3c^3} \omega_{ab}^4 d_{ba}^2, \quad (1)$$

$$\omega_{ab} = \frac{E_b - E_a}{\hbar}. \quad (1)$$

Здесь  $\omega_{ab}$  — частота перехода между уровнями  $a$  и  $b$ ,  $d_{ab}$  — дипольный момент уровней  $a$  и  $b$ ,  $c$  — скорость света,  $J$  — вероятность излучения фотона в единицу времени,  $E_b$  и  $E_a$  — энергии уровней  $a$  и  $b$  соответственно.

Мы предполагаем, что управление кубитом происходит на ГГц-частотах, следовательно, нам необходимо уметь задавать разницу между уровнями собственных состояний электрона в нашей конструкции. Таким образом, для выяснения оптимальных параметров двухточечной системы нам необходимо уметь сравнивать дипольные моменты уровней и разность уровней при различных конфигурациях данных параметров.

Результаты сравнения, полученные с помощью компьютерного моделирования, представлены на рис. 2–4.

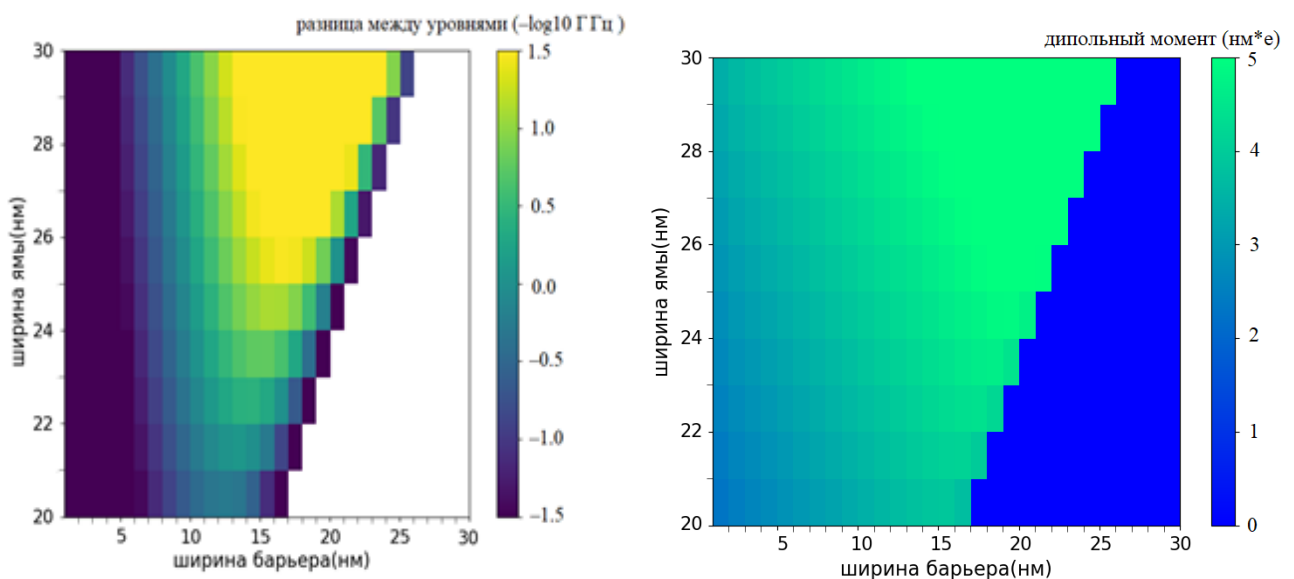


Рис. 2. Зависимость разницы между уровнями от ширины барьера (bound) и ширины ямы (width), высота барьера ( $H_1$ ) равна 0,2 эВ

Рис. 3. Зависимость дипольного момента от ширины барьера (bound) и ширины ямы (width), высота барьера ( $H_1$ ) равна 0,2 эВ

Дипольный момент определяется как

$$d_{01} = \int_{-\frac{\text{width}}{2}}^{\frac{\text{width}}{2}} \psi_0 e x \psi_1 dx. \quad (3)$$

Здесь  $d_{01}$  — дипольный момент уровней 0 и 1,  $\psi_0$  и  $\psi_1$  — волновые функции, соответствующие нахождению электрона в первой или второй яме соответственно.

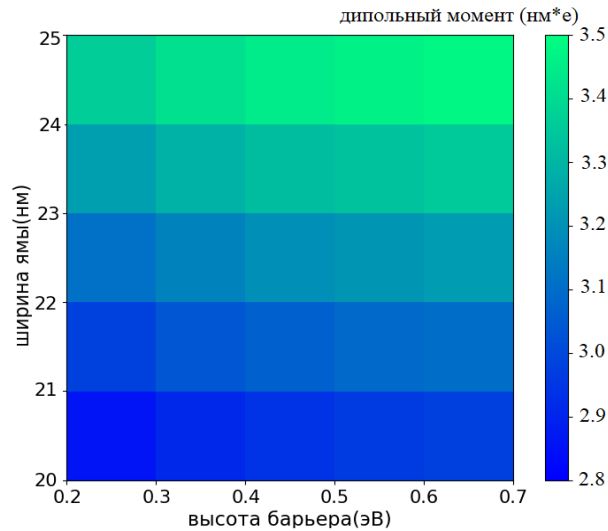


Рис. 3. Зависимость дипольного момента от высоты барьера ( $H_1$ ) и ширины ямы (width). Ширина барьера (bound) равна 5 нм

Из рисунков видно, что при увеличении ширины барьера (bound) разница между уровнями уменьшается, в то время как дипольный момент растет. Таким образом, для определения оптимальных параметров квантовой структуры нам необходимо принимать во внимание результаты на обоих рисунках.

Полученные результаты открывают возможности для дальнейшего изучения декогеренции в двухточечных полупроводниковых наноструктурах. Стоит отметить, что в данных структурах существуют механизмы релаксации из-за взаимодействия с акустическими фоновыми модами [2, 3]. Анализ этих релаксаций является целью следующих работ.

### Литература

1. *Melnikov A. A., Fedichkin L. E.* Quantum error correction in silicon charge qubits // Russian Microelectronics. 2013. V. 42. P. 148–154.
2. *Fedichkin L., Yanchenko M., Valiev K. A.* Coherent charge qubits based on GaAs quantum dots with a built-in barrier // Nanotechnology. 2000. V. 11. P. 387–391.
3. *Fedichkin L., Fedorov A.* Error rate of a charge qubit coupled to an acoustic phonon reservoir // Phys. Rev. A. 2004. V. 69(3): 032311.

УДК 004.056.53

## Обеспечение криптографической стойкости протоколов квантового распределения ключа в условиях глобальных расстояний

*В. А. Пастушенко*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Возможность появления универсального квантового компьютера представляет серьезную угрозу безопасности классических криптографических протоколов [1], опирающихся на предположения об ограниченности вычислительных мощностей, доступных потенциальному перехватчику. Квантовая криптография является ответом на этот вызов. В ее основе лежат протоколы квантового распределения ключа

(Quantum Key Distribution — QKD), секретность которых опирается только на законы квантовой физики [2–6]. Однако существующие QKD-протоколы оказываются эффективными лишь на сравнительно небольших расстояниях [7, 8]. Общим препятствием является граница PLOB (Pirandola-Laurenza-Ottaviani-Banch), согласно которой скорость секретного ключа уменьшается экспоненциально с длиной канала [9]. Использование доверенных узлов воспроизведения вдоль линии передачи не решает проблему, так как компрометирует безопасность всей схемы [10–12]. Возможным решением считается использование квантовых повторителей [13–15], однако их применение подразумевает проведение нетривиальных операций над сцепленными состояниями, что является технически сложной задачей; поэтому широкомасштабное применение квантовых повторителей остается за рамками современных технологий. В данной работе мы предлагаем альтернативный способ обойти ограничение PLOB, опираясь на законы квантовой термодинамики и метод физического контроля оптоволокна.

Конвенциональный подход к анализу секретности протоколов QKD подразумевает, что потенциальный перехватчик способен использовать все потери, происходящие в квантовом канале, соединяющем легитимных пользователей. Это накладывает существенные ограничения на интенсивности сигнальных квантовых состояний, которые могут быть использованы. Однако при тщательном квантово-механическом рассмотрении это предположение кажется нереалистичным: в действительности большинство потерь в оптических волокнах происходит за счет взаимодействия света с локальными рассеивателями и распределяется равномерно по линии (далее такие потери мы будем называть естественными). Опираясь на термодинамические рассуждения [16–18] и используя методы квантовой теории информации, мы оцениваем количество информации, которую перехватчик может получить в ходе реалистичной атаки, использующей потери, и показываем, что она куда меньше, чем подразумевает консервативная оценка.

Потери, отличные от естественных, в свою очередь можно контролировать физически. Мы опираемся на технику физического контроля линии — томографию, предполагающую, что легитимные пользователи обнаруживают локальные вмешательства, сравнивая постоянно обновляемую томограмму линии с исходной, невозмущенной. Данный метод томографии подразумевает отправку высокочастотных тестовых световых импульсов и анализ их отраженных (с помощью метода, известного как рефлектометрия [19]) и прошедших компонентов. Мы показываем, что использование данного метода сужает количество атак, которые перехватчик может провести, оставшись незамеченным, до создания небольших искусственных локальных утечек сигнала. Это дает легитимным пользователям возможность заметно уточнить оценку сверху на информацию перехватчика, повысить интенсивности сигнальных состояний и использовать для поддержания интенсивности сигнала стандартные оптоволоконные усилители, что в итоге приводит к высоким скоростям секретной генерации ключа на расстояниях, которые не были достижимыми ранее.

В работе в качестве примера рассмотрен конкретный протокол QDK, для него найдена зависимость информации перехватчика от точки вмешательства и доли отводимого сигнала, проведен анализ корреляций, возникающих в измерениях перехватчика и легитимного получателя в силу использования оптических усилителей, предложена оптимальная процедура постселекции и найдена зависимость достижимой скорости генерации от наблюдаемых параметров.

## Литература

1. *Shor P. W.* Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer // *SIAM Rev.* 1999. V. 41. P. 303–332.
2. *Bennett C. H., Brassard G.* Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing // *Proc. IEEE Int. Conf. Comput. Syst. Signal Process.* 1984. P. 175–179.
3. *Ekert A. K.* Quantum cryptography based on Bell’s theorem // *Phys. Rev. Lett.* 1991. V. 67. P. 661–663.
4. *Bennet C. H.* Quantum cryptography using any two nonorthogonal states // *Phys. Rev. Lett.* 1992. V. 68. P. 3121–3124.
5. *Bruss D.* Optimal eavesdropping in quantum cryptography with six states // *Phys. Rev. Lett.* 1998. V. 81. P. 3018–3021.
6. *Pirandola S.* [et al.]. Advances in quantum cryptography // *Adv. Opt. Photon.* 2020. V. 12. P. 1012–1236.
7. *Pitaluga M.* [et al.]. 600-km repeater-like quantum communications with dual-band stabilization // *Nat Photon.* 2021. V. 15. P. 530–535.
8. *Wang S.* [et al.]. Twin-field quantum key distribution over 830-km fibre // *Nat Photon.* 2022. V. 16. P. 154–161.
9. *Pirandola S., Laurenza R., Ottaviani C., Banchi L.* Fundamental limits of repeaterless quantum communications // *Nat. Commun.* 2017. V. 8: 15043.
10. *Liao S. K.* [et al.]. Satellite-relayed intercontinental quantum network // *Phys. Rev. Lett.* 2018. V. 120: 030501.
11. *Chen Y. A.* [et al.]. An integrated space-to-ground quantum communication network over 4,600 kilometres // *Nature.* 2021. V. 589. P. 214–219.
12. *Chen T. Y.* [et al.]. Implementation of a 46-node quantum metropolitan area network // *npj Quantum Inf.* 2021. V. 7: 134.
13. *Kimble H. J.* The quantum internet // *Nature.* 2008. V. 453. P. 1023–1030.

14. Sangouard N., Simon C., de Riedmatten H., Gisin N. Quantum repeaters based on atomic ensembles and linear optics // Rev. Mod. Phys. 2011. V. 83. P. 33–80.
15. Simon C. [et al.]. Quantum repeaters with photon pair sources and multimode memories // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 98: 190503.
16. Lesovik G. B., Sadovskyy I. A., Suslov M. V., Lebedev A. V., Vinokur V. M. Arrow of time and its reversal on the IBM quantum computer // Sci. Rep. 2019. V. 9. P. 4396.
17. Kirsanov N. S. [et al.]. Entropy dynamics in the system of interacting qubits // J. Russ. Laser Res. 2018. V. 39 P. 120–127.
18. Lesovik G. B., Lebedev A. V., Sadovskyy I. A., Suslov M. V., Vinokur V. M. H-theorem in quantum physics // Sci. Rep. 2016. V. 6: 32815.
19. Tateda M., Horiguchi T. Advances in optical time domain reflectometry // J. Lightwave Technol. 1989. V. 7. P. 1217–1224.

УДК 530.145

## Оценки точности информационных состояний квантовых битов

*Е. А. Паньковец<sup>1</sup>, Л. Е. Федичкин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физико-технологический институт им. К. А. Валиева РАН

При экспериментальном исполнении задач квантовой обработки информации неизбежно возникают ошибки. По этой причине полезно иметь способ количественно описывать несовершенства, возникающие в ходе выполнения квантового алгоритма, с помощью одного скалярного параметра. В данной работе рассматриваются меры, характеризующие различие между реальными и идеализированными квантовыми процессами. Обсуждаются их достоинства и недостатки. Также с помощью этих мер были произведены оценки того, насколько изменяется состояние кубита под воздействием шума. Были рассмотрены 3 модели шума: деполяризующий канал, амплитудное и фазовое затухание.

Ранее в статье [1] были сформулированы условия, налагаемые на меру  $\Delta$ , характеризующую расстояние между 2 квантовыми процессами: а)  $\Delta$  имеет физическую интерпретацию; б) является метрикой; в)  $\Delta(\mathcal{I} \otimes \mathcal{E}, \mathcal{I} \otimes \mathcal{F}) = \Delta(\mathcal{E}, \mathcal{F})$  — это условие соответствует тому, что при добавлении не изменяющейся анциллы, значение метрики сохраняется; г)  $\Delta(\mathcal{E}_1 \circ \mathcal{E}_2, \mathcal{F}_1 \circ \mathcal{F}_2) \leq \Delta(\mathcal{E}_1, \mathcal{F}_1) + \Delta(\mathcal{E}_2, \mathcal{F}_2)$ .

Были рассмотрены 5 мер из работ [1, 2]. Их описания и свойства представлены в таблице. Нужно отметить, что все меры, кроме 3-й и 5-й, являются метриками, а 3-я и 5-я могут породить метрику (например, таким образом:  $\sqrt{1 - \Delta(\mathcal{E}, \mathcal{F})}$ ). Метрики, представленные в таблице (или метрики, порожденные мерами из таблицы) удовлетворяют свойствам в)–д) (не все из них имеют хорошую физическую интерпретацию и легко вычисляются).

№	Мера	Особенности
1	$D(\mathcal{E}, \mathcal{E}^{\text{id}}) = \sup_{ \psi\rangle} (\ \mathcal{E}(\psi) - \mathcal{E}^{\text{id}}(\psi)\ _{\lambda}),$ <p>здесь <math>\ \cdot\ _{\lambda}</math> — операторная норма.</p> $\ \sigma\ _{\lambda} := \sup_{\varphi \neq 0} \left[ \frac{\langle \varphi   \sigma^{\dagger} \sigma   \varphi \rangle}{\langle \varphi   \varphi \rangle} \right]^{1/2}.$ <p>Если <math>\sigma</math> — эрмитова матрица (этот случай интересен, потому что <math>[\mathcal{E}(\rho) - \mathcal{E}^{\text{id}}(\rho)]</math> — эрмитова матрица):</p> $\ \sigma\ _{\lambda} = \max_i  \lambda_i .$	<p>Показывает максимальное различие между полученным состоянием и ожидаемым (что может быть более релевантным для квантовых вычислений);</p> <p>Удовлетворяет свойству в) на широком классе процессов;</p> <p>Для нахождения нужно решать задачу оптимизации.</p>



2	$\Delta(\mathcal{E}, \mathcal{E}^{id}) = d_{\max}(\mathcal{I}_A \otimes \mathcal{E}_Q, \mathcal{I}_A \otimes \mathcal{E}_Q^{id}),$ где $d_{\max}(\mathcal{E}, \mathcal{F}) = \frac{1}{2} \max_{ \psi\rangle} \text{Tr}  \mathcal{E}(\psi) - \mathcal{F}(\psi) ,$ Здесь $ X  = \sqrt{X^\dagger X}$	Показывает различие между полученным и ожидаемым распределениями наблюдаемой в худшем случае; На практике требует увеличения числа кубитов в 2 раза для выполнения условия в) [3]; Для вычисления нужно решать задачу оптимизации, что затратно в случае большого количества кубитов.
3	$\Delta(\mathcal{E}, \mathcal{E}^{id}) = F_{\min}(\mathcal{I}_A \otimes \mathcal{E}_Q, \mathcal{I}_A \otimes \mathcal{E}_Q^{id}),$ где $F_{\min}(\mathcal{E}, \mathcal{F}) = \min_{ \psi\rangle} F(\mathcal{E}(\psi), \mathcal{F}(\psi)), F(\mathcal{E}(\psi), \mathcal{F}(\psi))$ — fidelity для матриц $\mathcal{E}(\psi)$ и $\mathcal{F}(\psi)$	
4	$\Delta(\mathcal{E}, \mathcal{F}) = \frac{1}{2} \text{Tr}(\rho_{\mathcal{E}}, \rho_{\mathcal{F}}),$ где $\rho_{\mathcal{E}}, \rho_{\mathcal{F}}$ — матрицы Чоя.	Показывает различие между полученным и ожидаемым распределением наблюдаемой в среднем; Имеет простую формулу, легко вычисляется; На практике требует увеличения числа кубитов в 2 раза.
5	$\Delta(\mathcal{E}, \mathcal{F}) = F(\rho_{\mathcal{E}}, \rho_{\mathcal{F}}),$ где $F(\rho_{\mathcal{E}}, \rho_{\mathcal{F}})$ — fidelity для матриц $\rho_{\mathcal{E}}, \rho_{\mathcal{F}}$ .	Те же свойства, что и в № 4; Для вычисления не нужно делать полную томографию.

Стоит отметить, что для вычисления всех мер, кроме первой (обозначим ее буквой  $D$ ) используется анцилла, которая не изменяется. Эта анцилла должна содержать как минимум столько же кубитов, сколько содержится в вычислительной части регистра, что крайне неудобно с точки зрения эксперимента. В этом смысле мера  $D$  более удачна. Помимо свойств, перечисленных в таблице, мера  $D$  обладает понятной физической интерпретацией для 1 кубита (см. рис. 1).

Таким образом, в случае, когда не нужно оценивать различие между полученным и ожидаемым распределением наблюдаемой, использование меры  $D$  является предпочтительным.

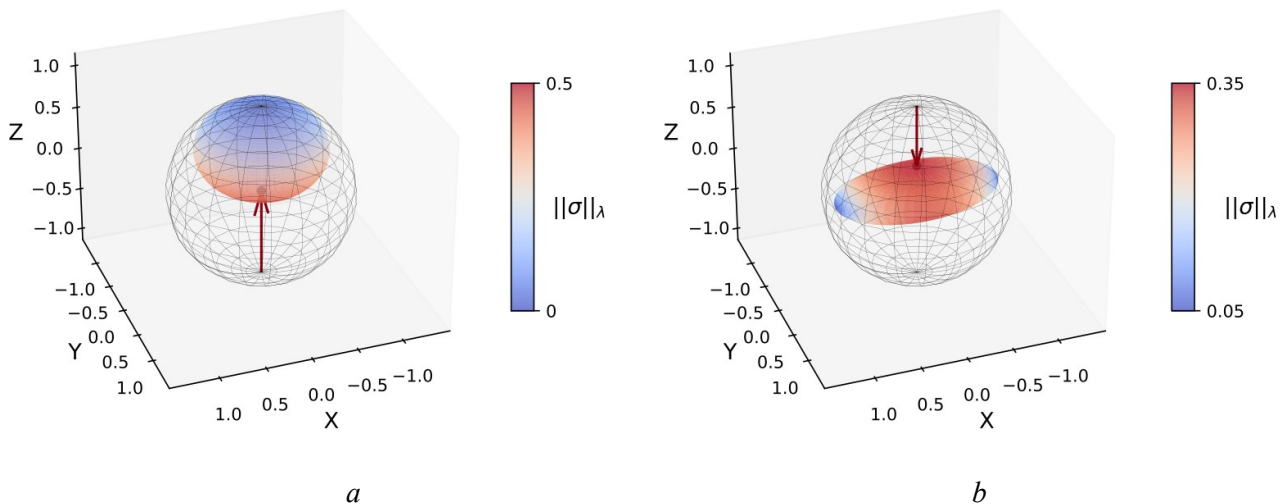


Рис. 1. Геометрическая интерпретация меры  $D$  в случае:  $a$  — амплитудного затухания с параметром  $\gamma = 0,5$ ;  $b$  — деполаризующего канала с различными параметрами сжатия ( $p = 0,3$ ,  $q = 0,05$ ,  $r = 0$ ). Стрелка показывает, как изменяется состояние, на котором достигается  $\sup \|\sigma\|_\lambda$ , где  $\sigma = |\psi\rangle\langle\psi| - \mathcal{N}(|\psi\rangle\langle\psi|)$ ,  $\mathcal{N}$  — канал шума. Длина стрелки равна  $2D$

## Литература

1. *Gilchrist A., Langford N.K., Nielsen M.A.* Distance measures to compare real and ideal quantum processes // *Phys. Rev. A.* 2005. V. 71: 062310.
2. *Fedichkin L., Fedorov A., Privman V.* Measures of decoherence // *Proc. of SPIE — The International Society for Optical Engineering.* 2003. V. 510. P. 243–254.
3. *Aharonov D., Kitaev A., Nisan A.* Quantum circuits with mixed states // *Proc. of the Thirtieth Annual ACM Symposium on Theory of Computing.* 1998. P. 20–30.

УДК 535.92

### Физические неклонированные функции на основе рэлеевского рассеяния в оптоволоконных волноводах

*М. В. Яровиков*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рассмотрен процесс рэлеевского рассеяния в оптоволоконном волноводе с прямоугольным профилем показателя преломления. Изучен процесс формирования уникального для волокна обратнорассеянного импульса. С использованием рефлектометрических технологий продемонстрирована практическая уникальность оптических волокон, а также исследованы их пространственные характеристики.

Пользуясь подходом, предложенным в одной из предыдущих работ [1], можно получить интенсивность, рассеянную обратно, на входе волновода:

$$P_s(t) = \frac{Wv_{gr}}{2} \int_0^L dz \alpha(z)B(z)F(v_{gr}t - 2z)e^{-2z\alpha}, \quad (1)$$

где  $W$  — полная энергия импульса,  $L$  — полная длина волокна,  $B(z) = \frac{3}{2n^2(z)w_0^2(z)} \left(\frac{c}{\omega}\right)^2$  — коэффициент обратного захвата,  $n(z)$  — коэффициент преломления,  $w_0(z)$  — размер модового пятна,  $\omega$  — частота света,  $c$  — скорость света,  $v_{gr}$  — групповая скорость света,  $F(2z - v_{gr}t)$  — огибающая импульса по энергии. Таким образом, наблюдаемая интенсивность представляет собой свертку огибающей импульса с уникальными пространственными характеристиками волокна  $\alpha(z)$  и  $B(z)$ . Формируемый уникальный отклик волокна можно пронаблюдать с использованием, например, рефлектометрических технологий (optical time domain reflectometry или OTDR).

Если избавиться от линейного тренда в логарифмических координатах графика рассеянного обратно излучения от времени (рефлектограмме), который соответствует экспоненциальному спаду, то можно получить паттерны, подобные тем, что можно наблюдать на рис. 1.

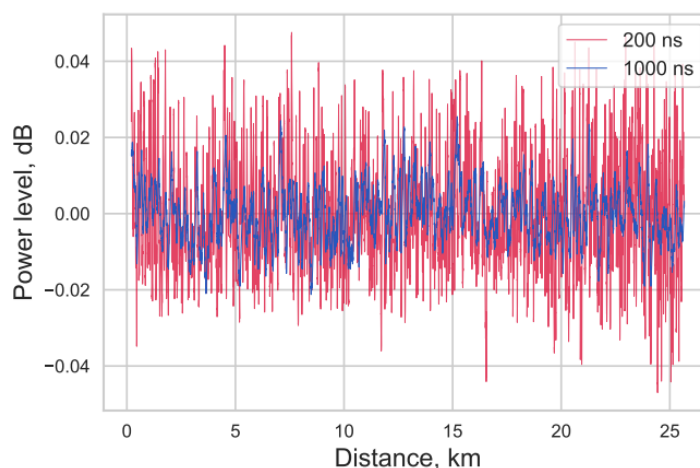


Рис. 1. Пример наблюдаемых рассеивающих флуктуаций у волокна длиной 25 км. Синие измерения были проведены с оптическим импульсом длительностью 1000 нс, красный — 200 нс. Можно видеть, что наблюдаемый отклик зависит от длины импульса

Хотя уникальные рассеивающие характеристики оптоволоконного волновода нельзя измерить напрямую, но их свойства можно исследовать спектрально и косвенно подтвердить экспериментальную формулу.

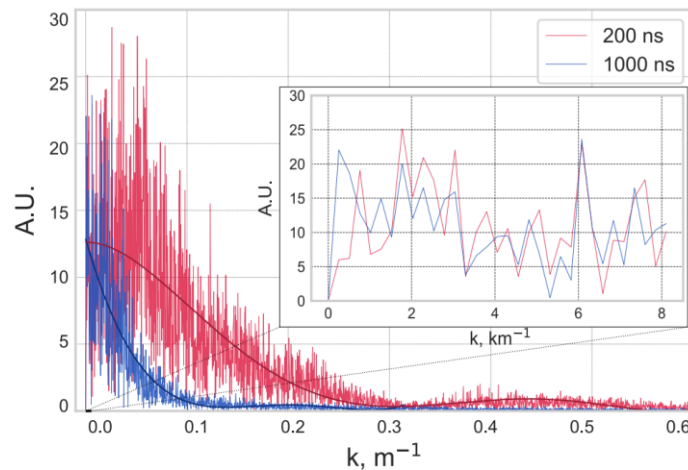


Рис. 2. Пространственный спектр наблюдаемых флуктуаций (модуль). Как можно наблюдать, спектр близок к белому шуму. Также нижние частоты, соответствующие большим периодам, не подавляются сверткой с прямоугольным импульсом и поэтому выглядят похоже для разных импульсов

### Литература

1. *Brinkmeyer E.* Analysis of the backscattering method for single-mode optical fibers // J. Opt. Soc. Am. 1980. V. 70. P. 1010–1012.
2. *Hartog A., Gold M.* On the theory of backscattering in single-mode optical fibers // J. Light. Technol. 1984. V. 2. P. 76–82.

УДК 530.145

## Реализация квантовых операций с помощью кубитов, построенных на основе трех квантовых точек

*З. И. Саяпин<sup>1,2</sup>, Л. Е. Федичкин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физико-технологический институт имени К. А. Валиева РАН

Одним из перспективных способов построения масштабируемых квантовых информационных процессоров является подход, основанный на твердотельных технологиях. В работе [1] была продемонстрирована возможность создания массивов из трех туннельно-связанных квантовых точек с достаточно малыми шумами и контролируемых в степени, достаточной для создания квантовой логики. В работе [2] показывается, что в широком диапазоне параметров архитектура кубитов на трех квантовых точках может иметь меньшую скорость декогеренции по сравнению с архитектурой на двух. Реализация однокубитных операций над кубитами, построенными на основе пары туннельно-связанных квантовых точек, была показана в [3], эти результаты обобщаются на случай трех квантовых точек. Для построения универсального набора квантовых операций необходима также возможность осуществления нетривиальной двухкубитной операции. Одной из таких операций является CNOT. Добавление третьей квантовой точки потенциально может позволить уменьшить время выполнения CNOT по сравнению со способом, описанным в [3].

Кубит представляет собой три туннельно-связанные квантовые точки, расположенные в линию. Состояния  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$  кодируются локализацией электрона в крайних квантовых точках, при этом квантовая точка, расположенная в середине массива, является вспомогательной, ей соответствует состояние  $|m\rangle$ . При помощи электродов возможно контролировать высоту потенциальных барьеров между квантовыми точками, открывая и закрывая переходы между ними по желанию [1].

Принцип работы алгоритма CNOT основан на кулоновском отталкивании электронов. Контролируемый (target) и контролирующий (control) кубиты располагаются, как показано на рис. 1. В случае, когда контролирующий кубит находится в состоянии  $|0\rangle$ , электрон контролирующего кубита увеличивает потенциальные барьеры в контролируемом кубите, блокируя в нем переходы из крайних состояний. В случае, когда контролирующий кубит находится в состоянии  $|1\rangle$ , электрон контролирующего кубита в силу своего отдаления слабо меняет потенциальные барьеры в контролируемом кубите и не блокирует в

нем переходы. Схематично алгоритм выполнения операции CNOT изображен на рис. 1. Зеленым цветом показаны квантовые точки, между которыми туннельный барьер, контролируемый электродами, открыт, а красным цветом — между которыми он закрыт.

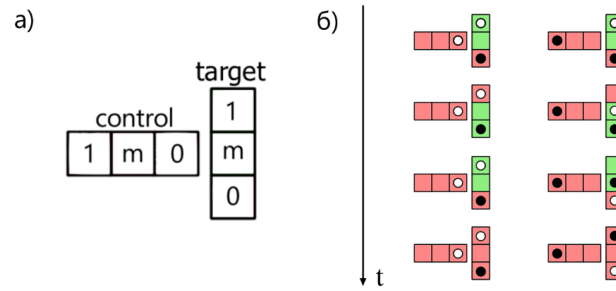


Рис. 1. Эскиз вентиля CNOT (а), соседние квадраты представляют квантовые точки, связанные туннельной связью, схематичное представление работы алгоритма CNOT (б), кружочки демонстрируют обмен амплитудами между состояниями в позиционном базисе

Модельный гамильтониан предлагаемой реализации CNOT является кусочно-постоянной функцией времени и описывается выражениями:

$$H_{\text{CNOT}}(t) = \begin{cases} H_1 = \hbar\Omega \cdot (|11\rangle\langle 1m| + |m1\rangle\langle mm| + \text{H.c.}), & 0 \leq t < \frac{\pi}{2\Omega}, \\ H_2 = \hbar\Omega \cdot (|1m\rangle\langle 10| + |mm\rangle\langle m0| + \text{H.c.}), & \frac{\pi}{2\Omega} \leq t < \frac{2\pi}{\Omega}, \\ H_1, & \frac{2\pi}{\Omega} \leq t \leq \frac{5\pi}{2\Omega}, \end{cases}$$

где H.c. обозначает эрмитово сопряжение,  $\Omega$  — частота туннелирования, которая соответствует высоте потенциального барьера между соседними квантовыми точками, совместные состояния кубитов записываются в форме  $|control, target\rangle$ . Операция выполняется за время  $T_{\text{CNOT}} = \frac{5\pi}{2\Omega}$ .

Другой важной задачей является поддержание исходного состояния кубита во времени, т. е. тривиальная операция. Рассмотрим модель распада состояния кубита, построенного на основе трех квантовых точек. Будем рассматривать процесс, при котором есть релаксация между вторым и первым возбужденными энергетическими состояниями, а также между первым и основным энергетическими состояниями, описываемые скоростями релаксации  $\Gamma_{21}$  и  $\Gamma_{10}$  соответственно. Величины  $\Gamma_{ij}$  могут быть определены для различных механизмов релаксации [4]. В энергетическом базисе матрица плотности данного процесса запишется в виде [5]

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} 1 - \rho_{11}e^{-\Gamma_{10}t} - \rho_{22}e^{-\Gamma_{20}t} & \rho_{01}e^{-(\Gamma_{10}/2 - i\varepsilon_{10}/\hbar)t} & \rho_{02}e^{-(\Gamma_{20}/2 - i\varepsilon_{20}/\hbar)t} \\ \rho_{10}e^{-(\Gamma_{10}/2 + i\varepsilon_{10}/\hbar)t} & \rho_{11}e^{-\Gamma_{10}t} & \rho_{12}e^{-((\Gamma_{10} + \Gamma_{20})/2 - i\varepsilon_{21}/\hbar)t} \\ \rho_{20}e^{-(\Gamma_{20}/2 + i\varepsilon_{20}/\hbar)t} & \rho_{21}e^{-((\Gamma_{10} + \Gamma_{20})/2 + i\varepsilon_{21}/\hbar)t} & \rho_{22}e^{-\Gamma_{20}t} \end{pmatrix},$$

где  $\rho_{ij}$ ,  $i, j \in \{0, 1, 2\}$  — компоненты матрицы плотности начального состояния в энергетическом базисе,  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_i - \varepsilon_j$ ,  $\varepsilon_i$ ,  $i \in \{0, 1, 2\}$  — уровни энергии в системе из трех квантовых точек. Для оценки степени декогерентности процесса была использована операторная мера декогерентности  $D$ , описанная в [6]:

$$D(t) = \sup_{\rho(0)} (\|\rho(t) - \rho_{\text{ideal}}(t)\|_\lambda),$$

где  $\rho_{\text{ideal}}(t)$  — это матрица плотности идеального процесса, при котором отсутствует релаксация между уровнями ( $\Gamma_{21} = \Gamma_{10} = 0$ ). Для выбранной меры декогерентности  $D$  были получены оценки снизу и сверху:

$$\max\left(1 - e^{-\Gamma_{10}t}, 1 - e^{-\Gamma_{21}t}\right) \leq D(t) \leq \frac{2}{\sqrt{3}} \max\left(1 - e^{-\Gamma_{10}t}, 1 - e^{-\Gamma_{21}t}\right).$$

### Литература

1. *Eng K.* [et al.]. Isotopically enhanced triple-quantum-dot qubit // *Sci. Adv.* 2015. V. 1(4): e1500214.
2. *Vasiliev A. Y., Fedichkin L.* Estimations of phonon-induced decoherence in silicon–germanium triple quantum dots // *Quantum Inf. Process.* 2014. V. 13(8). P. 1893–1905.
3. *Fedichkin L., Yanchenko M., Valiev K. A.* Coherent charge qubits based on GaAs quantum dots with a built-in barrier // *Nanotechnology.* 2000. V. 11. P. 387–391.
4. *Fedichkin L., Fedorov A.* Error rate of a charge qubit coupled to an acoustic phonon reservoir // *Phys. Rev. A.* 2004. V. 69: 032311.
5. *Blum K.* Density matrix theory and applications. Third edition. — Berlin: Springer, 2012. Ch. 8.
6. *Fedichkin L., Fedorov A., Privman V.* Measures of decoherence // *Proc. SPIE. Quantum Information and Computation.* 2003. V. 5105. DOI: 10.1117/12.486792.

УДК 530.145

## Алгоритм эффективной обработки сигналов при передаче на дальние расстояния по квантовому каналу

*В. Д. Статъев*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Во время передачи когерентного состояния по оптоволоконной линии сигнал принимает множество искажений, связанных с неидеальностью квантового канала и оборудования или возможным наличием нелегитимной третьей стороны, желающей отвести себе часть информационного сигнала. Мы предлагаем практическую реализацию схемы ретрансляции сигнала на дальние расстояния [1, 2] и его программную обработку с учетом особенностей используемого квантового канала. Данная обработка включает в себя как эффективное различение квантовых состояний при использовании соответствующей кодировки на входе, так и анализ криптостойкости системы на основе ее текущего состояния.

Как это принято в теории протоколов квантового распределения ключа, весь основной сигнал, представляющий из себя закодированные когерентные состояния, передается по квантовому каналу с возможными искажениями. Для детектирования таких искажений и борьбы с ними легитимные пользователи коммуницируют по авторизованному классическому каналу. Путем оценки ошибок, возникших при передаче информации, пользователи принимают решение о релевантности их данных и целесообразности продолжения протокола для дальнейшего безопасного обмена информацией. В случае возникновения больших ошибок, с чем мы столкнулись в условиях передачи сигнала на большие расстояния, требуется эффективный способ борьбы с ними. Для решения данной проблемы нами реализовано применение комбинации низкоплотностных кодов коррекции ошибок (LDPC) совместно с кодами повторения к реальному квантовому каналу. При этом на этапе коррекции ошибок может разглашаться порядка 90% информационного сигнала, что необходимо учесть в конце протокола при усилении секретности, чтобы сжать наш ключ настолько, что перехватчик не будет иметь никакой информации о нем.

### Литература

1. *Kirsanov N. S., Pastushenko V. A., Kodukhov A. D., Yarovikov M. V., Sagingalieva A. B., Kronberg D. A., Pflitsch M., Vinokur V. M.* Forty thousand kilometers under quantum protection // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2301.10610v1.
2. *Kirsanov N. S., Kenbaev N. R., Sagingalieva A. B., Kronberg D. A., Vinokur V. M., Lesovik G. B.* Long-distance quantum key distribution based on the physical loss control // arXiv preprint. [2021]. arXiv: 2105.00035v1.

---

# Секция физики твердого тела

---

Председатель: А. А. Левченко (д. ф.-м. н., зав. кафедрой)

Зам. председателя: В. Н. Зверев (д. ф.-м. н.)

Секретарь: А. Ф. Шевчун (к. ф.-м. н.)

---

Дата: 06.04.2023

Время: 10:00

УДК 538.97

## Перестраиваемый терагерцевый фазовращатель на основе мембран GaAs

*А. С. Астраханцева<sup>1,2</sup>, А. Шуваев<sup>3</sup>, П. А. Гусихин<sup>1</sup>, А. Пименов<sup>3</sup>, И. В. Кукушкин<sup>1</sup>, В. М. Муравьев<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт физики твердого тела имени Ю. А. Осипяна РАН

<sup>3</sup>Институт физики твердого тела (Вена, Австрия)

Создание фазированной антенной решетки на терагерцевых (ТГц) частотах является одной из наиболее серьезных задач в современной высокочастотной электронике [1]. Возможные области применения таких фазированных решеток направлены на разработку терагерцевых систем связи. Однако существующие подходы к построению терагерцевых фазовращателей имеют некоторые недостатки. Например, фазовращатели, построенные на PIN-диодах или переключающих элементах FET, страдают от относительно больших вносимых потерь и дискретности изменения фазы. Жидкокристаллические фазовращатели громоздки и медлительны, что ограничивает их применение. Управляемые затвором метаповерхности графена имеют ограниченную возможность фазовой перестройки наряду с проблемой изготовления крупномасштабных образцов достаточной чистоты и однородности. Также представляет интерес ряд новых способов модуляции фазы терагерцевой волны, включая активные метаматериалы и устройства с большим терагерцевым сдвигом фазы, вызванным фототермическим эффектом. В то же время первые попытки создать фазовращатель на основе хорошо зарекомендовавшей себя технологии изготовления транзисторов с высокой подвижностью электронов (HEMTs) с двумерной электронной системой (2DES), ограниченной гетероинтерфейсом GaAs/AlGaAs, также оказались безуспешными. Поэтому необходимы физические подходы, опирающиеся на современные полупроводниковые технологии.

Плазмоника считается одним из методов продвижения электроники в терагерцевый диапазон частот. Плазмонный отклик проявляется в том, что 2DES действует как реактивный элемент. Действительно, проводимость 2DES хорошо описывается моделью Друде

$$\sigma(\omega) = \frac{n_s e^2 \tau}{m^*} \frac{1}{1 + i\omega\tau},$$

где  $n_s$  — двумерная электронная плотность,  $m^*$  — эффективная масса, а  $\tau$  — время релаксации. Тогда импеданс двумерной плазмы может быть выражен следующим образом [2, 3]:

$$Z_{2DES}(\omega) = R + i\omega L_K, \quad L_K = \frac{m^*}{n_s e^2}.$$

Здесь  $L_K$  — кинетическая индуктивность немагнитного происхождения, возникающая в результате коллективного движения электронов. Следовательно, частота 2D-плазмона с волновым вектором  $q$  может быть описана как  $\omega_p(q) = 1/\sqrt{L_K C_p(q)}$ , где  $C_p(q) = 2\varepsilon_0 \varepsilon^*/q$  — это распределенная собственная емкость 2DES. Здесь  $\varepsilon^*$  — эффективная диэлектрическая проницаемость окружающей среды, а  $\varepsilon_0$  — электрическая постоянная. Ключевое преимущество 2D-плазмонных устройств заключается в том, что их отклик можно настраивать в широких диапазонах, изменяя электронную плотность 2DES  $n_s$ .

В данной работе осуществлена и исследована реализация активного плазмонного терагерцевого фазовращателя с плотностью 2DES, настраиваемой с помощью внешнего напряжения на затворе. Нами

достигнут диапазон перестройки фазы до  $41^\circ$  при вносимых потерях  $-2,2$  дБ [4]. Мы демонстрируем работу фазовращателя при температурах до 80 К. Однако мы считаем, что нет принципиальных трудностей в расширении этого диапазона до комнатной температуры на терагерцевых частотах. Структурно фазовращатель легко масштабируется до плоской фазированной антенной решетки.

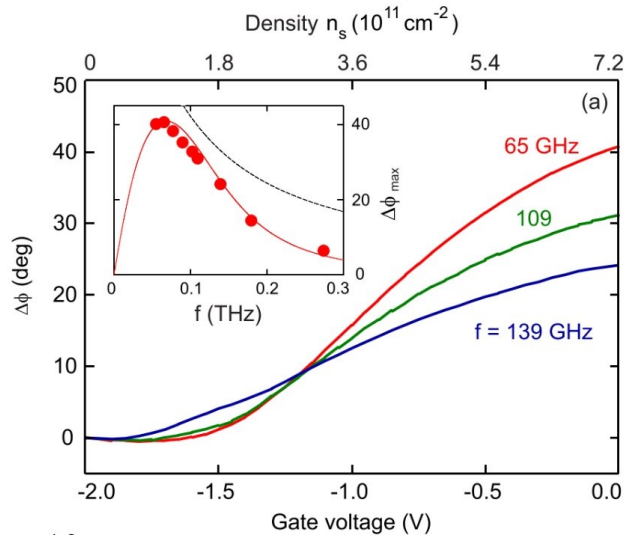


Рис. 1. Фазовая зависимость проходящего излучения от напряжения на затворе (нижняя ось) и соответствующей электронной плотности под «пальцами» затвора (верхняя ось). На вставке показан максимально достижимый сдвиг фазы  $\Delta\phi_{\text{max}}$  в зависимости от частоты падающего ТГц излучения

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 19-72-30003.

### Литература

1. Wang L. [et al.]. A review of THz modulators with dynamic tunable // *Nanomaterials*. 2019. V. 9(7): 965.
2. Burke P. J. [et al.]. Ballistic transport at GHz frequencies in ungated HEMT structures // *Appl. Phys. Lett.* 2000. V. 76: 745.
3. Muravev V. M. [et al.]. A tunable plasmonic resonator using kinetic 2D inductance and patch capacitance // *Appl. Phys. Lett.* 2020. V. 117(15): 151103.
4. Muravev V. M. [et al.]. Tunable terahertz phase shifter based on GaAs semiconductor technology // *Appl. Phys. Lett.* 2022. V. 121(5): 051101.

УДК 669.1

## Микроструктура стали 17Cr–4Ni–4Cu после 3D-печати и моделирующей сварки

*Е. В. Васильев*

Университет Нью-Гэмпшира

Нержавеющая дисперсионно-упрочняемая сталь 17-4 (17Cr–4Ni–4Cu) является широко используемым сплавом из-за хорошей коррозионной стойкости, высоких механических свойств, которые относительно легко изменять (различная термическая обработка может контролировать образование, рост и распределение вторичной фазы на основе меди), а также хорошей свариваемости. Материал также является отличным кандидатом для 3D-печати.

В данной работе сталь 17-4 была изготовлена 3D-печатью с использованием порошков, распыленных газом в азоте (образец N<sub>2</sub>) либо в аргоне (образец Ar). Образцы затем были подвергнуты моделирующей сварке. Особый интерес представляло, образуется ли  $\delta$ -феррит в зоне термического влияния (ЗТВ).  $\delta$ -феррит представляет собой вредную фазу, которая довольно легко может образовываться при сварке нержавеющих сталей. Было показано, что эта фаза приводит к снижению ударной вязкости, если она присутствует в сварном шве.

Микроструктуры образцов стали 17-4 после 3D-печати показаны на рис. 1. Образец Ar, по-видимому, имеет большие зерна, чем образец N<sub>2</sub>. Оба образца имеют ряд выделений вторичной фазы на основе

меди, которые образуются во время термообработки и, вероятно, образовались из-за термоциклирования во время процесса 3D-печати.

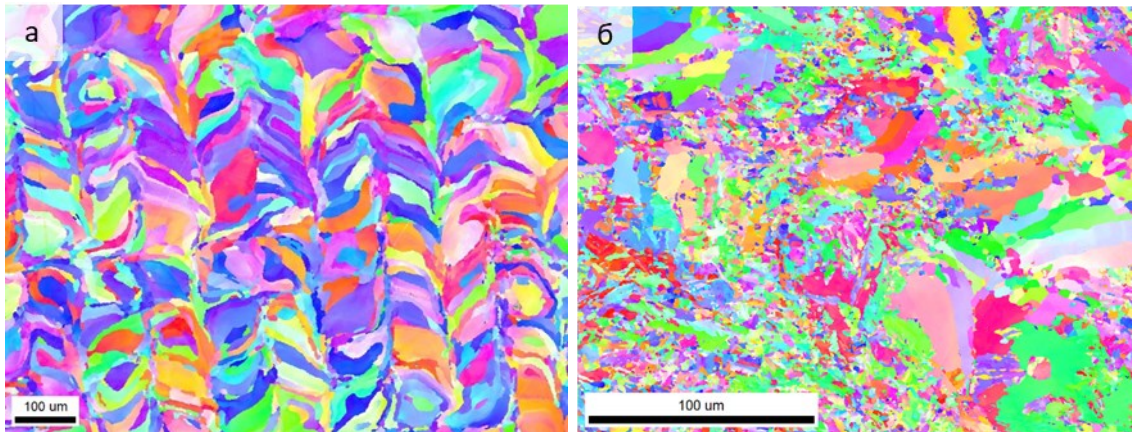


Рис. 1. EBSD карты микроструктуры стали 17-4 после 3D-печати: *a* — образец Ar; *б* — образец N<sub>2</sub>

На картах средней разориентации зерен (GAM) синий цвет соответствует низкому значению GAM, а зеленый цвет соответствует высокому значению GAM (рис. 2). Известно, что мартенсит имеет большие искажения решетки, приводящие к высоким локальным разориентациям. Напротив, феррит в недеформированном состоянии имеет гораздо меньшие искажения решетки и меньшие локальные разориентации. Учитывая это, феррит и мартенсит можно разделить, приписывая соответственно низкой или высокой локальной разориентации, отраженной на карте GAM. Для образца Ar карта показывает в основном синий и светло-зеленый цвета, которые соответствуют низким значениям GAM. Крупный размер зерна и низкие значения GAM свидетельствуют о наличии в материале ферритной структуры. Наконец, для образца N<sub>2</sub> карта GAM показывает сочетание ярко-зеленого и темно-синего цветов. Это позволяет сделать вывод, что структура состоит как из феррита (~37%), так и из мартенсита (~63%).

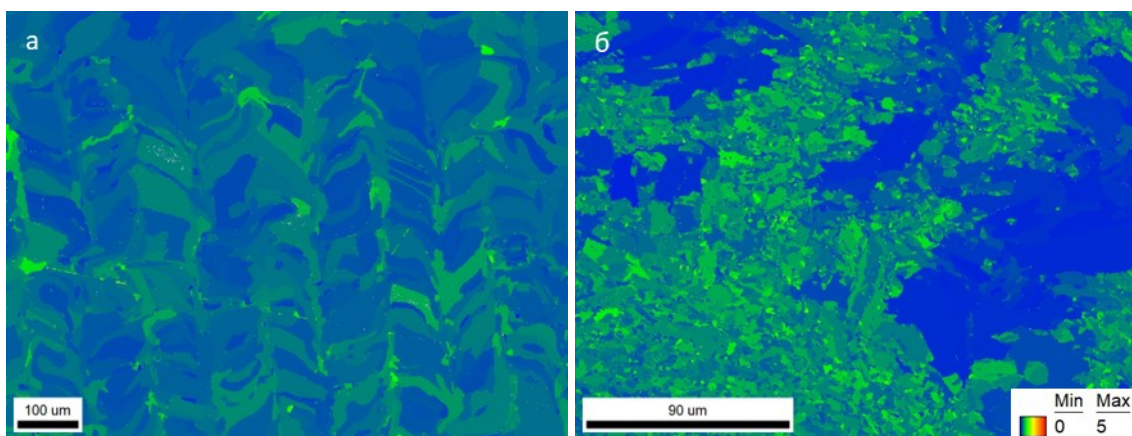


Рис. 2. Карты средней разориентации зерен (GAM): *a* — образец Ar; *б* — образец N<sub>2</sub>

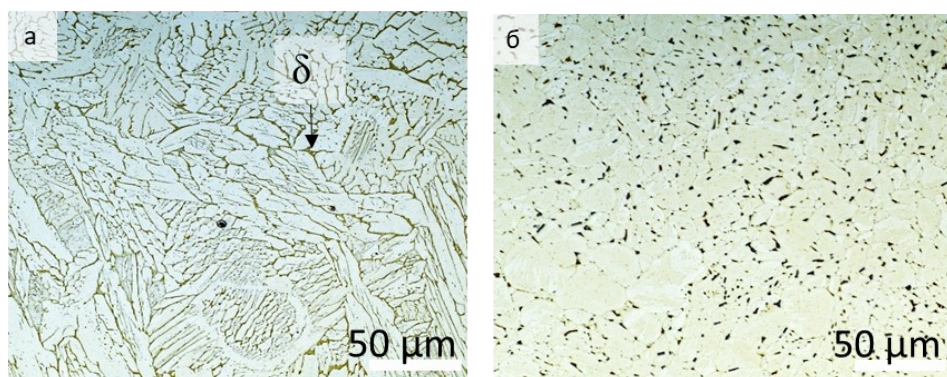


Рис. 3. Микроструктура зоны термического влияния: *a* — образец Ar; *б* — образец N<sub>2</sub>



После моделирующей сварки микроструктура образца Ag приобрела почти дендритную структуру с образованием  $\delta$ -феррита между дендритами (рис. 3). Это продолжается по всей длине ЗТВ, хотя, начиная со средней части, количество  $\delta$ -феррита несколько уменьшается. На холодном конце образца (вне ЗТВ)  $\delta$ -феррит отсутствует. Также присутствуют как мелкие зерна игольчатой формы, так и более крупные зерна  $\alpha$ -феррита. В образце  $N_2$   $\delta$ -феррит отсутствует. Микроструктура ЗТВ выглядит как изначальная структура с большим количеством выделений вторичной фазы. Имеются некоторые области укрупнения границ зерен по всей ЗТВ, которые могут быть образованием феррита.

### Литература

1. Kellogg F., Vasilev E., Kudza, A., Taggart-Scarff J., Marsico J., Knezevic M., McWilliams B. Physical simulations of heat-affected zone microstructures to compare weldability characteristics of additively manufactured and wrought 17-4 stainless steel // Mater. Charact. 2022. V. 185(3): 111714.

УДК 538.958

## Эффект Штарка в гетероструктурах с монослоями дихалькогенидов переходных металлов

Г. М. Голышков<sup>1,2</sup>, А. С. Бричкин<sup>1</sup>, А. В. Черненко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ИФТТ РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Ван-дер-ваальсовы гетероструктуры на основе монослоев дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) привлекают значительное внимание за счет своих уникальных свойств, к которым в первую очередь относятся сильное взаимодействие ДПМ со светом, что делает их перспективными объектами для применения в оптоэлектронных устройствах [1]. Метод механической экзfolиации позволяет получить гетероструктуры с монослоями ДПМ с характерным размером плоскости структуры в десятки микрометров и толщиной в десятки–сотни нанометров, которые оказываются стабильными в окружающей среде и устойчивыми к термомоциклированию. Это открывает путь к изучению их свойств методом микрофотолюминесценции в широком диапазоне температур. Благодаря сильному квантовому ограничению носителей заряда в монослоях ДПМ, энергия связи экситона оказывается чрезвычайно высокой (несколько сотен мэВ), что позволяет наблюдать экситонные эффекты при температурах вплоть до комнатной.

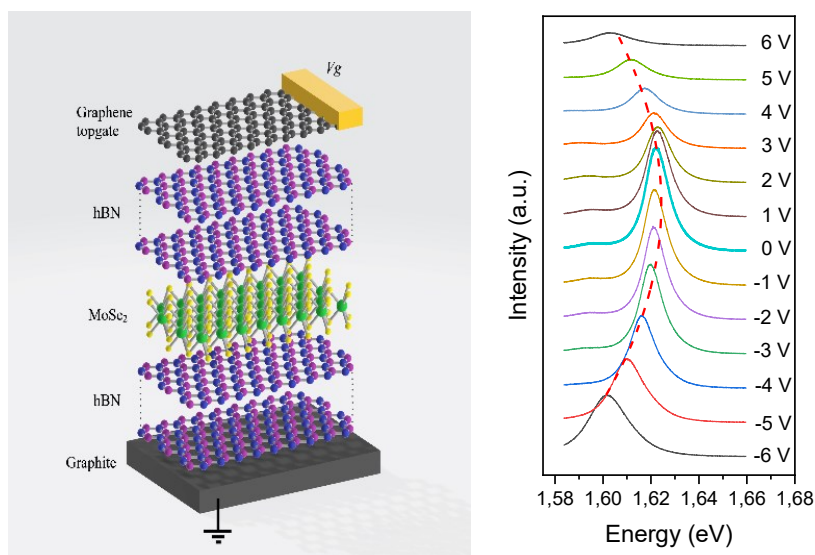


Рис. 1. Схема структуры с контактами для приложения вертикального электрического поля

Рис. 2. Спектры ФЛ одиночных экситонов  $MoSe_2$  при разных значениях разности потенциалов  $V_g$ .  $T = 13$  К, накачка лазером с  $\lambda = 532$  нм, и плотность мощности  $15,6$  кВт/см<sup>2</sup>

Электрическое поле является важнейшим инструментом, позволяющим изменять энергетические уровни и плотности носителей заряда в низкоразмерных полупроводниковых структурах. Вертикальное

электрическое поле, перпендикулярное монослою ДПМ, воздействует на основные и возбужденные состояния экситонов, модифицируя их спектры фотолюминесценции (ФЛ) благодаря штарковскому сдвигу. Кроме того, оно изменяет не только положения, но и интенсивности и ширины линий ФЛ.

Для наблюдения эффекта Штарка были приготовлены образцы, в которых монослои ДПМ инкапсулировались слоями гексагонального нитрида бора hBN. Инкапсулированные монослои, в свою очередь, помещались между нижним слоем графита и верхним слоем графена, выполняющими роль обкладок конденсатора, к которым приложена внешняя разность потенциалов  $V_g$  (рис. 1).

Линии ФЛ экситона (X) и отрицательно заряженного триона (T) хорошо разрешаются в спектре ФЛ и при приложении разности потенциалов между контактами демонстрируют значительный штарковский сдвиг до 25 мэВ, который хорошо описывается квадратичной зависимостью от электрического поля (рис. 2). При измерении ФЛ наблюдается изменение интенсивности линий ФЛ экситона и триона, связанное с изменением плотности носителей заряда при изменении температуры и внешнего поля, а также диссоциацией экситонов в электрическом поле.

## Литература

1. Kolobov A., Tominaga J. Two-dimensional transition-metal dichalcogenides. — New York: Springer, 2016.

УДК 538.915

## Плазменные возбуждения в двумерной электронной системе в форме квадрата

*А. М. Зарезин<sup>1,2</sup>, В. М. Муравьев<sup>1</sup>, П. А. Гусихин<sup>1</sup>, И. В. Кукушкин<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Институт физики твердого тела РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Плазменные возбуждения в двумерных электронных системах (ДЭС) изучаются теоретически и экспериментально на протяжении более чем 50 лет. Такой интерес связан с рядом уникальных свойств, отсутствующих у аналогичных возбуждений в трехмерном случае. 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 бесщелевой 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,  $\epsilon$  и  $\epsilon_0$  — диэлектрическая проницаемость окружения ДЭС и диэлектрическая постоянная, соответственно,  $m^*$  — эффективная масса электронов.

Помимо вышеупомянутых факторов, на свойства плазмонов в ДЭС также значительно влияет геометрия системы. В отличие от случая неограниченной ДЭС (с размерами много больше волнового вектора возбуждения), случай ДЭС ограниченных размеров является гораздо более сложным для рассмотрения из-за нелокального характера уравнений Максвелла. Наиболее изученными конфигурациями ДЭС являются диск и узкая полоска. Для геометрии диска [2, 3] каждая плазменная мода (за исключением осесимметричных) расщепляется на краевую и объемную моды в ненулевом магнитном поле, приложенном перпендикулярно плоскости ДЭС. При этом разные магнитоплазменные моды не взаимодействуют друг с другом. В случае узкой полоски [4, 5] возбуждаются одномерные плазмоны с волновым вектором вдоль длинной стороны полоски с линейным законом дисперсии и отрицательной магнитодисперсией. На более высоких частотах возбуждаются двумерные плазмоны с волновым вектором вдоль ширины полоски.

Помимо данных геометрий существует еще одна конфигурация ДЭС, представляющая интерес. Наиболее простой формой с точки зрения технологии изготовления образца является квадрат. В то же время переход от хорошо изученной геометрии диска к геометрии квадрата сопряжен с существенным понижением симметрии системы, что, как ожидается, должно оказать влияние на характер магнитоплазменных возбуждений. Однако физические свойства плазменных возбуждений в ДЭС в форме квадрата были изучены меньше всего по сравнению с остальными геометриями.

Настоящая работа посвящена исследованию плазменных возбуждений в неэкранированной ДЭС в форме квадрата. В качестве контрольного образца также была исследована система в форме диска. 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.

Экспериментально полученные зависимости резонансной частоты от магнитного поля для нескольких наиболее низкочастотных плазменных мод показаны на рис. 1 (точками) слева и справа для образцов в форме диска и квадрата соответственно. Во-первых, резонансные частоты фундаментального плазменного возбуждения в нулевом магнитном поле практически совпадают, что представляется вполне ожидаемым для образцов с одинаковым латеральным размером. Во-вторых, в случае геометрии квадрата фундаментальная плазменная мода расщепляется на объемную и краевую моды в ненулевом магнитном поле. При этом в нулевом магнитном поле так же, как и в случае с геометрией диска, расщепление отсутствует. Однако экспериментальные данные демонстрируют интересную и неожиданную особенность, качественно отличающую магнитодисперсионную зависимость ДЭС в форме диска от зависимости ДЭС в форме квадрата. На рис. 1 (справа) магнитодисперсионная зависимость объемной плазменной моды  $m1$  демонстрирует особенность в районе 25 ГГц. На рис. 1 также показаны результаты численного моделирования магнитоплазменных возбуждений в ДЭС, воспроизводящие результаты эксперимента с хорошей точностью, в том числе и наблюдаемую особенность. Проведенное аналитическое рассмотрение данного вопроса [6] позволяет идентифицировать данную особенность как проявление эффектов гибридизации разных магнитоплазменных мод (объемная мода  $m1$  и краевая мода  $m3$ , рис. 1, справа) в случае образца в форме квадрата. Результаты численного моделирования также предсказывают аналогичный эффект для более высокочастотных плазменных мод.

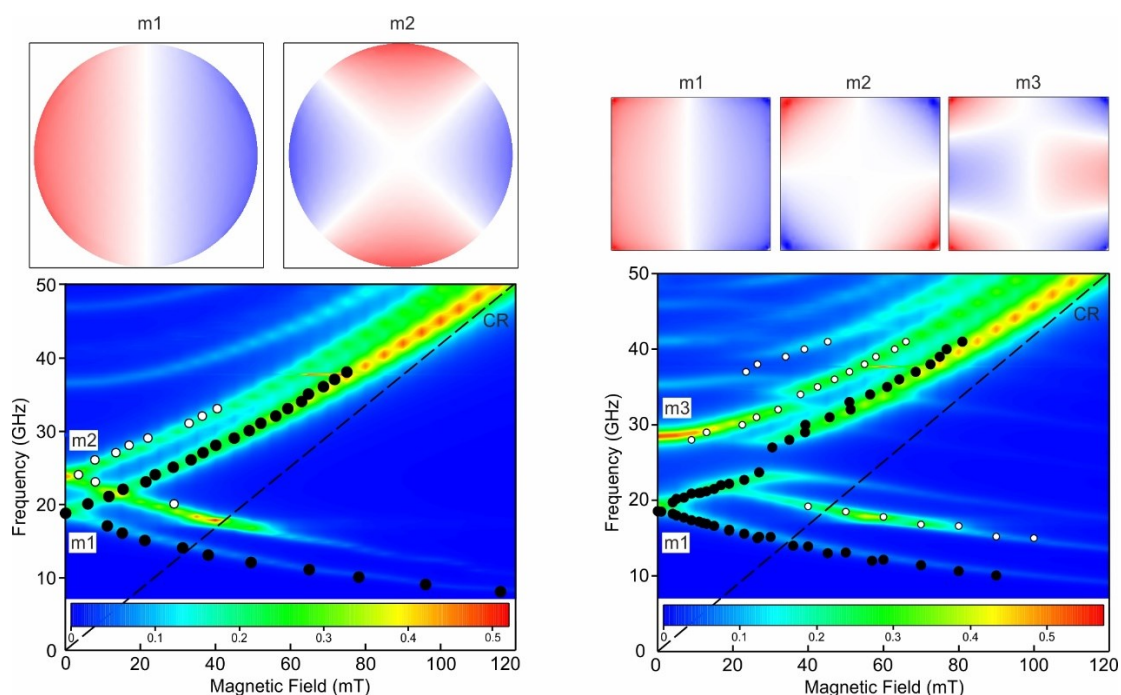


Рис. 1. Магнитодисперсионные зависимости для ДЭС в форме диска (слева) и квадрата (справа). Точками показаны экспериментальные данные. Цвет — микроволновое поглощение (численное моделирование). На вставках — амплитуда осцилляций зарядовой плотности (численное моделирование) для нескольких наиболее низкочастотных мод. Из статьи [6]

## Литература

1. Stern F. Polarizability of a two-dimensional electron gas // Phys. Rev. Lett. 1967. V. 18. P. 546–548.
2. Allen S. J., Störmer H. L., Hwang J. C. M. Dimensional resonance of the two-dimensional electron gas in selectively doped GaAs/AlGaAs heterostructures // Phys. Rev. B. 1983. V. 28(8). P. 4875–4877.
3. Fetter A. L. Magnetoplasmons in a two-dimensional electron fluid: Disk geometry // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. P. 5221–5227.
4. Demel T., Heitmann D., Grambow P., Ploog K. One-dimensional plasmons in AlGaAs/GaAs quantum wires // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. P. 2657–2660.

5. *Kukushkin I. V.* [et al.], Spectrum of one-dimensional plasmons in a single stripe of two-dimensional electrons // Phys. Rev. B. 2005. V. 72(16): 161317.
6. *Zarezin A.M.* [et al.] Plasmons in a square of two-dimensional electrons // Phys. Rev. B. 2023. V. 107(7): 075414.

УДК 537.9; 537.632.4

## Магнитооптические свойства и расчет констант затухания $(\text{YBiCa})_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ в широком диапазоне температур

*Н. Е. Купчинская<sup>1</sup>, Ф. М. Максимов<sup>1,2</sup>, А. И. Чернов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Российский квантовый центр

В последние десятилетия феррит-гранаты были предметом обширных фундаментальных исследований [1, 2]. В результате обнаружилась огромная область экзотических и полезных физических свойств при комнатной температуре, таких как низкое магнитное затухание [3, 4] и высокая магнитооптическая (МО) фарадеевская активность [5], что открыло перспективы для их технологического применения. Феррит-гранаты продолжают находить применение в физике конденсированных сред, в частности, используются в спинтронике для хранения и обработки данных с помощью спиновых волн (СВ). В пленках железо-иттриевого граната (ЖИГ) СВ могут переносить информацию на сотни микрон [6] с диапазоном частот от гигагерц до терагерц [7]. Для таких материалов основным показателем качества является коэффициент гильбертовского затухания  $\alpha$  [7, 8], который должен быть как можно меньше для применения в спинтронике. Поскольку ЖИГ имеет сверхнизкое гильбертовское затухание [4], он является идеальной средой для распространения СВ на большие расстояния.

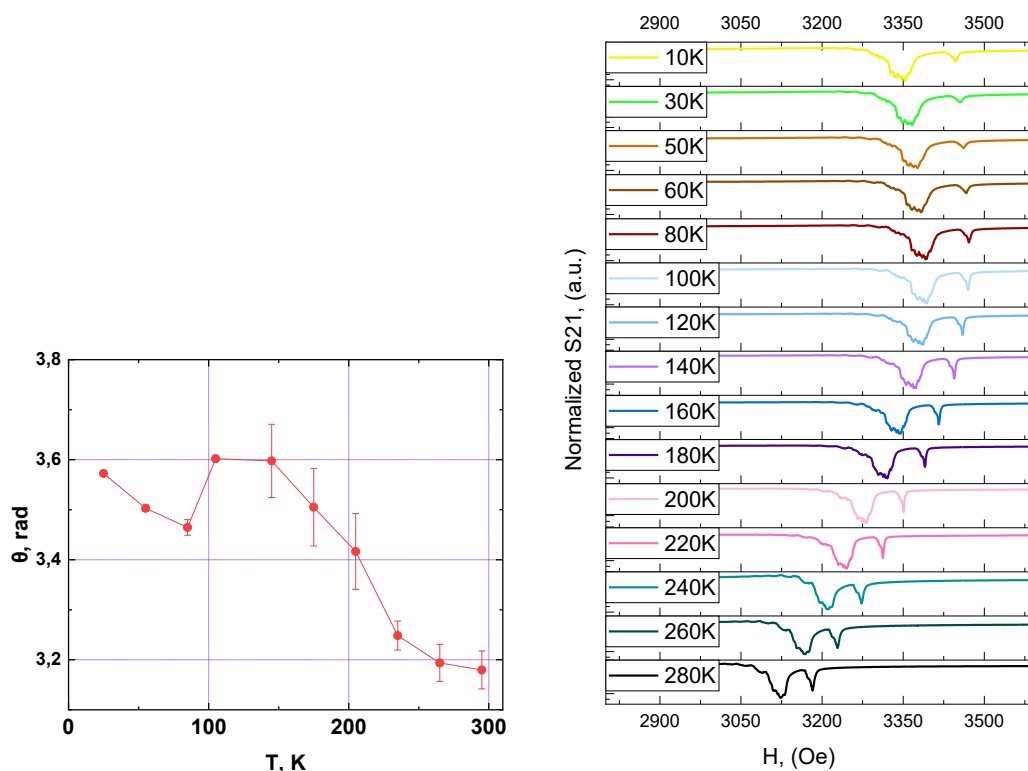


Рис. 1. Нормированные спектры пропускания  $S_{21}$   $(\text{YBiCa})_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$  на фиксированной частоте 4 ГГц при ориентации перпендикулярной м.п. для различных температур (a); температурная зависимость угла вращения Фарадея для  $(\text{YBiCa})_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$  (b)

Пленка  $(\text{YBiCa})_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$  толщиной 2100 нм была исследована методом ферромагнитного резонанса (ФМР) с использованием векторного анализатора цепей. Спектры были получены в виде серии разверток по полю с фиксированными частотами. Образец помещался на копланарный волновод, прикрепленный к холодному пальцу криостата. Отклик системы изучался путем анализа передаваемого микроволнового сигнала  $S_{21}$  (рис. 1a). Внешнее магнитное поле прикладывалось перпендикулярно плоскости образца. Из

данных ФМР-спектров была также рассчитана константа затухания Гильберта, которая слабо изменяется в температурном диапазоне 10÷280 К. Для этих температур в аналогичных условиях были проведены исследования Фарадеевского вращения данного образца (рис. 1*b*). В эксперименте был использован лазер с длиной волны 660 нм мощностью 120 мВт, луч проходил через поляризатор и призму Волластона, скрещенные под углом 45°, поле переключалось от –2500 Ое до 2500 Ое, что выше поля насыщения образца. При этом магнитооптический отклик регистрировался с помощью балансного детектора.  $(YBiCa)_3Fe_5O_{12}$  показал высокие значения угла вращения Фарадея, что делает его перспективным материалом для спинтронных приложений.

### Литература

1. Hansen P., Krumme J.-P. Magnetic and magneto-optical properties of garnet films//Thin solid films. 1984. V. 114(1–2). P. 69–107.
2. Willoughby A., Capper P., Kasap S. Spintronics for Next Generation Innovative Devices. — Hoboken: Wiley, 2015.
3. Marwan D., Popova E., Hehn M. [et al.] Damping of standing spin waves in bismuth-substituted yttrium iron garnet as seen via the time-resolved magneto-optical Kerr effect//Phys. Rev. Appl. 2019. V. 12(4): 044006.
4. Houchen Ch., Peng L. Nanometer-thick yttrium iron garnet films with extremely low damping//Magn. Lett. 2014. V. 5(1): 014017.
5. Shaposhnikov A. N., Prokopov A. R. Magneto-optics of single and microresonator iron-garnet films at low temperatures//Opt. Mat. 2016. V. 52(2). P. 21–25.
6. Haiming Y., D'Allivy Kelly O. Magnetic thin-film insulator with ultra-low spin wave damping for coherent nanomagnonics//Scientific reports. 2014. V. 4(1): 6848.
7. Serga A., Chiriac A. YIG magnonics//J. Phys. D: Appl. Phys. 2010. V. 43. 264002.
8. Zakeri Kh., Lindner J. Spin dynamics in ferromagnets: Gilbert damping and two-magnon scattering//Phys. Rev. B. 2007. V. 76(10): 104416.

УДК 537.622

## Поведение доменной структуры поверхности соединений $TbFe_{11-x}Ti$ в условиях механических напряжений

Т. Р. Мишурина, Г. Г. Дунаева, А. И. Синкевич, Е. М. Семенова

Тверской государственный университет

Соединения типа  $RFe_{11}Ti$  со структурой  $ThMn_{12}$  рассматриваются как перспективные материалы, поскольку характеризуются высокой намагниченностью насыщения и температурой Кюри [1]. Также особенностью этих составов является широкая область гомогенности. Интересным объектом для исследования является состав  $TbFe_{11}Ti$ , который приобретает МКА типа «ось легкого намагничивания» выше 320 К. Варьирование содержания железа в  $TbFe_{11-x}Ti$  в пределах области гомогенности позволяет сместить температуру спин-переориентационного фазового перехода в область более низких температур. Таким образом, например, состав  $TbFe_9Ti$  при комнатной температуре является одноосным. Однако, как и на аналогичных составах с диспрозием [2], поведение ДС характеризуется некоторыми особенностями: механическое воздействие на поверхность приводит к изменению конфигурации доменов, а иногда и к невозможности их выявления отдельными методами. При этом с течением времени происходит релаксация поверхностного слоя магнетика, в результате которого равновесная ДС восстанавливается. Время релаксации зависит от степени воздействия на поверхность и от температуры и может составлять от нескольких секунд до нескольких недель. Такое поведение может быть следствием магнитострикционных искажений тетрагональной решетки в результате механического воздействия на поверхность. На рис. 1 представлены изображения, полученные методом полярного эффекта Керра на одном и том же участке поверхности поликристаллического образца сразу после полировки (рис. 1*a*), а также в процессе (рис. 1*b*) и после нагревания до 393 К (рис. 1*в*). Видно, что в процессе нагрева на поверхности формируются дополнительные домены, соответствующие базисной плоскости одноосного магнетика. В работе приводятся экспериментальные данные исследования ДС соединений  $TbFe_{11-x}Ti$  и обсуждаются механизмы релаксации магнитной структуры поверхности.

Исследования выполнены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006) в лаборатории магнитных материалов ЦКП ТвГУ.

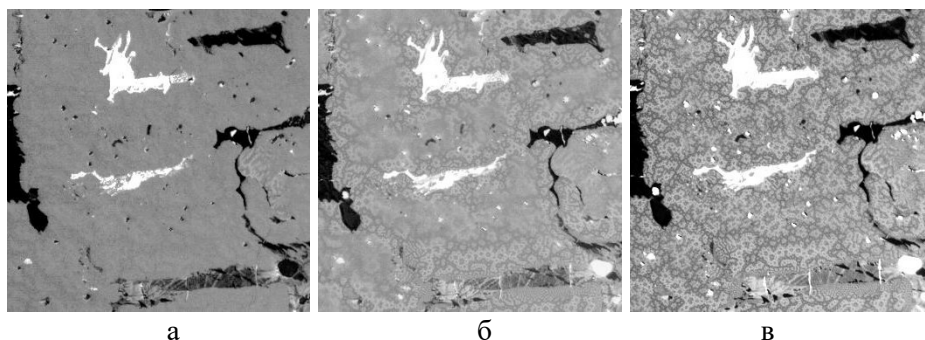


Рис. 1. Температурная трансформация ДС поликристалла TbFe<sub>9</sub>Ti после механического воздействия на поверхность

### Литература

1. *Ochirkhuyag T., Hong S. C., Odkhuu D.* Intrinsic hard magnetism and thermal stability of a ThMn<sub>12</sub>-type permanent magnet // *npj Comput. Mater.* 2022. V. 8(1): 193.
2. *Semenova E. [et al.]* Stress-induced magnetic domain structure in DyFe<sub>11</sub>Ti compound // *EPJ Web of Conferences.* 2018. V. 185(4): 04027.

УДК 537.525.5

### Термическая стойкость механических свойств покрытий ZrN на быстрорежущей стали

*А. А. Плясункова<sup>1</sup>, С. В. Злоцкий<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Национальный детский технопарк

<sup>2</sup>Белорусский государственный университет

В процессе использования инструмент из быстрорежущей стали испытывает действие высоких температур, трения, в результате чего с материалом происходят необратимые изменения: износ, коррозия. Для повышения износостойкости и устойчивости к окислению материал инструмента модифицируется. Эффективным способом улучшения требуемых физических свойств материалов является нанесение покрытий. Покрытия позволяют улучшать свойства рабочей поверхности инструмента, не изменяя при этом материал основной конструкции. Материал покрытия должен удовлетворять следующим характеристикам: твердость (влияет на качество обработки материалов или изделий), устойчивость износу и окислению; эти характеристики должны сохраняться в высокотемпературных режимах работы. Анализ литературных источников [1, 2] показал, что в качестве покрытий хорошо показали себя карбиды и нитриды тугоплавких металлов.

Объектами исследования в работе являлись сталь P6M5 и покрытие ZrN на подложке из стали P6M5. Покрытия ZrN синтезировались методом нанесения вещества из плазменной фазы в условиях конденсации с ионной бомбардировки (КИБ).

Для исследования характеристик стали P6M5 и покрытия ZrN были применены такие методы исследования структуры, как рентгеноструктурный анализ и изучение твердости, износостойкости.

Методом рентгеноструктурного анализа исследована структура исходных образцов. Анализ полученных результатов показал, что исходная сталь представляет собой  $\alpha$ -Fe (мартенсит) с параметром решетки 0,28738 нм и карбид M<sub>6</sub>C с параметром решетки 1,10489 нм. Выявлено также небольшое присутствие фазы Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Проведенный количественный анализ показал содержание фазы  $\alpha$ -Fe — 82%, M<sub>6</sub>C — 16% и оксида — 2%. Образование оксида связано с естественным окислением поверхности стали.

Покрытие ZrN представляет собой однофазную систему ZrN с параметром решетки 0,45944 нм. Присутствие оксидов циркония не выявлено. Проведенные исследования твердости показали, что твердость стали составляет 275±7 HV, а твердость покрытия ZrN — 2050±50 HV.

При отжиге образцов они окисляются (покрываются оксидной пленкой), в результате чего свойства поверхности образцов изменяются. Были проведены исследования образцов, которые подверглись отжигу. Измерения проводились для образцов стали и покрытия состава ZrN, которые подверглись отжигу при температурах 400, 500, 600, 700, 800°C в течение разных промежутков времени (20, 40 и 80 мин).

Установлено, что фазовый состав стали P6M5 не меняется. Не формируются новые фазы и не распадаются существующие. Происходит изменение только интенсивности пиков, соответствующих оксиду

железа  $Fe_2O_3$ . Параметры решеток  $\square$ -Fe и  $M_6C$  уменьшаются как с увеличением времени отжига, так и с ростом температуры отжига. Это связано с процессами термического отжига дефектов в стали. При низких температурах 400–500°C изменения интенсивности дифракционных пиков оксида железа происходят после 80 мин. Для температур 600, 700, 800°C уже в первые 20 мин интенсивность процесса окисления значительно возрастает.

Для выявления изменений, связанных с ростом интенсивности дифракционных пиков оксида железа, был проведен количественный анализ, который показал, что с увеличением температуры отжига доля оксидной фазы растет, достигая 27%. Также наблюдается рост доли фазы с ростом времени отжига, и при увеличении температуры отжига скорость роста оксидов возрастает. При этом стоит отметить, что доля фазы  $M_6C$  практически не меняется. Таким образом, формирование и рост оксидной фазы происходит за счет окисления фазы  $\square$ -Fe.

Результаты исследования структуры покрытий ZrN от температуры отжига на воздухе свидетельствуют о том, что отжиг на воздухе до температуры 600°C не приводит к изменению фазового состава покрытия ZrN. Не выявлено формирование новых фаз и распад фазы ZrN. То есть не происходит процесса окисления и формирования оксида циркония.

Изменения структуры стали должны оказывать влияние на ее механические свойства, поэтому были проведены исследования твердости отожженных на воздухе образцов стали Р6М5 и покрытий ZrN.

При измерениях действующая нагрузка была равна 2 Н, размеры диагоналей отпечатков для покрытий ZrN — около 13 мкм, для стали — примерно 35 мкм. Это соответствовало глубине индентирования 1,9 и 5 мкм, соответственно.

Результаты измерения твердости стали Р6М5 приведены на рис. 1. Твердость представлена в единицах HV. Из рисунка видно, что при температуре отжига 400°C твердость стали практически не меняется. Это хорошо согласуется с данными, полученными методом рентгеноструктурного анализа, согласно которым не происходит значительного роста оксидов при данной температуре. Для температуры 500°C наблюдается рост твердости после 20 мин отжига, связанный с упрочнением стали Р6М5 в результате отпуска, а дальнейшее увеличение времени отжига незначительно уменьшает твердость. Для температуры 600°C происходит значительный рост твердости стали. Это происходит после отпуска (нагрева и охлаждения) стали благодаря тому, что в процессе отпуска возрастает количество дисперсных карбидных частиц легирующих компонентов, выделяющихся из мартенсита. При этом стоит отметить, что температура 600°C является максимальной температурой отпуска стали Р6М5, при которой наблюдается наибольшее повышение твердости [2]. Увеличение температуры отпуска выше 600°C приводит к значительному уменьшению твердости стали Р6М5. Так, при отжиге при температурах 700 и 800°C твердость стали уменьшается на 5 и 13% соответственно.

Установлено, что твердость покрытия при отжиге в температурном диапазоне 400–600°C остается постоянной, что хорошо согласуется с результатами рентгеноструктурного анализа. При температурах 700 и 800°C твердость покрытия уменьшается на 19–30%.

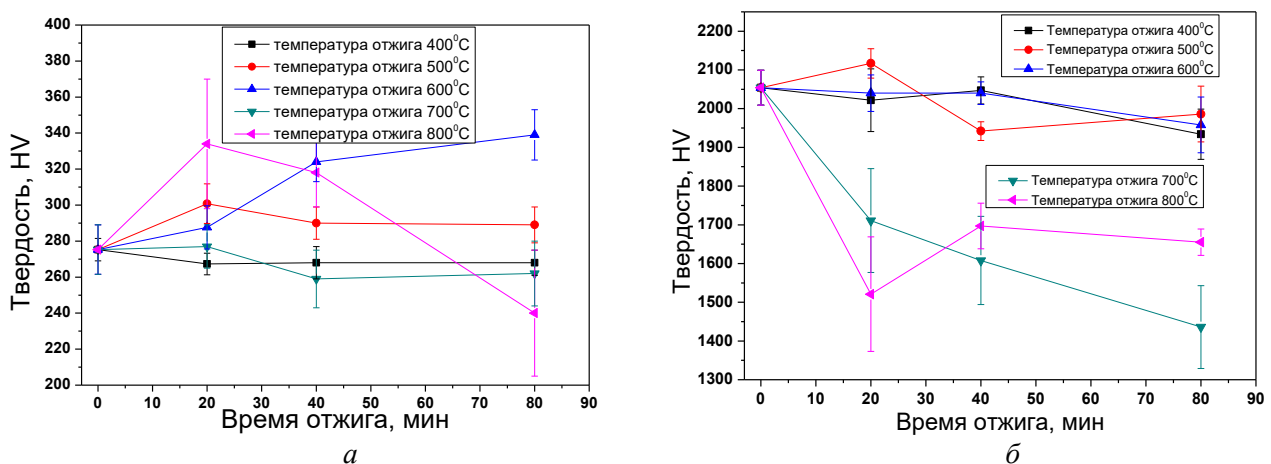


Рис. 1. График зависимости твердости стали Р6М5 (а) и покрытия ZrN (б) от времени отжига при различных температурах отжига

Исследования износа покрытий путем сравнения ширины треков показали, что отжиг приводит к росту в 2 раза ширины трека износа (увеличение износа). При этом увеличение температуры приводит только к небольшому увеличению износа (увеличение ширины трека на 10%).

Полученные результаты свидетельствуют о перспективности формирования покрытий ZrN на быстрорежущей стали Р6М5 с целью повышения механических свойств поверхности.

### Литература

1. *Верещака А. С.* [и др.] Работоспособность режущего инструмента с износостойкими покрытиями. — М.: Машиностроение, 1993.
2. *Rakhadilov B. K.* [et al.] Changing the structure and phases states and the microhardness of the R6M5 steel surface layer after electrolytic-plasma nitriding // *Eur. J. Phys. Funct. Mater.* 2018. V. 2(3). P. 259–266.

УДК 538.9

### Исследование механизмов электрической проводимости перфторсульфоновых мембран: исходной и модифицированной Tb (III)-формы

*Т. В. Резцов, Н. А. Лапатин*

РГПУ им. А. И. Герцена

Особая структура перфторсульфоновых мембран, имеющая в своей основе гибкий, но прочный и химически инертный фторуглеродный каркас, вызывает большой интерес у мирового сообщества. Большая часть исследований направлена на изучение протонной проводимости мембран в условиях невысокой влажности и повышенных температур. Основное применение данные мембраны нашли в топливных элементах, в качестве твердого протонсодержащего электролита [1]. Наличие активных сорбционных центров ( $-SO_3H$ ) в таких мембранах, как МФ-4СК, которая является российским аналогом Nafion, определяет возможность модификации подобных систем различными веществами, в результате чего полученные «новые» системы обладают уникальными, отличными от исходного состояния свойствами. Например, проявление интенсивной люминесценции соединений на основе лантаноидов и органических соединений [3], мало наблюдаемой у таковых в водной среде; исследование возможности сенсбилизации люминесценции в полученных системах и т. д. В массиве имеющейся литературы имеются данные об исследовании диэлектрических спектров мембраны в Na и H-формах [2, 4]. В связи с проявлением необычных свойств систем, содержащих лантаноиды, в данной работе была исследована проводимость H и Tb (III)-содержащих мембран, введенных в них путем ионно-обменной сорбции из водных растворов  $TbCl_3$  ( $10^{-3}$  моль/л).

В качестве исследуемого образца для данной работы были взяты перфторированные ионообменные мембраны МФ-4СК (НПО ОАО «Пластполимер», Санкт-Петербург) толщиной 150–200 мкм, полученные методом экструзии на заводе-производителе.

Были получены диэлектрические спектры исследуемых систем (температурная и частотная зависимости составляющих комплексной диэлектрической проницаемости). Измерения проводились на широкополосном диэлектрическом спектрометре «Концерт-81» (в Центре коллективного пользования диэлектрической спектроскопии при НИИ физики РГПУ им. А. И. Герцена) в интервале частот  $f = 1 \div 10^5$  Гц и температур  $T = 273 \div 403$  К. Также была получена температурная зависимость проводимости исходной пленки МФ-4СК и модифицированной тербием пленки. Для получения температурной зависимости проводимости использовалась установка TSC-II (Setaram). В результате данного эксперимента оба образца помещались в постоянное поле напряженностью 100 В/мм и линейно нагревались.

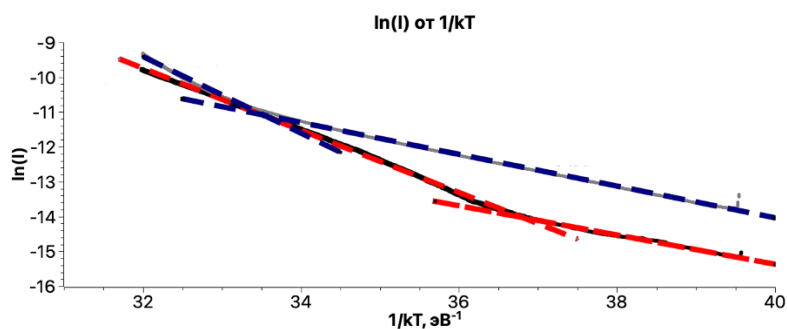


Рис. 1. Температурная зависимость проводимости (в координатах Аррениуса). Красные прямые — исходный образец, синие прямые — модифицированный образец



По итогам проведенных исследований была выявлена степенная зависимость удельной проводимости от частоты, характерная для прыжкового механизма проводимости. На температурной зависимости проводимости были выявлены два участка — как для модифицированной, так и для исходной мембраны (рис. 1). Для каждого образца были определены энергии активации, свидетельствующие о влиянии ионов тербия на проводимость мембраны.

Был сделан вывод, что повышение проводимости для модифицированного образца в области высоких температур свидетельствует о том, что происходит увеличение диссоциации протонированных сульфогрупп.

### Литература

1. Лебедева О. В. Протонпроводящие мембраны для водородно-воздушных топливных элементов // Изв. вузов. Прикладная химия и биотехнология. 2016. № 1. С. 7–19.
2. Малышкина И. А., Бурмистров С. Е. Диэлектрические спектры и эффекты проводимости в сульфированном политетрафторэтилене (Nafion) в ненабухшем состоянии // Вестник Московского ун-та. Сер. 3. Физика. Астрономия. 2006. № 2. С. 54–57.
3. Лопатин Н. А., Пак В. Н. Сорбция и спектрально-люминесцентные свойства азометиновых оснований в перфторсульфоновой мембране // Изв. Санкт-Петербургского государственного технологического ин-та (технич. ун-та). 2020. № 52. С. 45–49.
4. Castro R. A., Lopatin N. A., Karulina E. A., Reztsov T. V. Polarization properties of perfluorosulfonic membranes modified with terbium // St. Petersburg Polytechnic University Journal. Physics and Mathematics. 2021. V. 14(4). P. 126–134.

УДК 538.9

### Усиление эффективного $g$ -фактора в метаморфных гетероструктурах InGaAs/InAlAs

Н. С. Сандаков<sup>1</sup>, С. В. Гудина<sup>1</sup>, В. Н. Неверов<sup>1</sup>, А. С. Боголюбовский<sup>1</sup>, К. В. Туруткин<sup>1</sup>, М. В. Якунин<sup>1</sup>,  
И. С. Васильевский<sup>2</sup>, А. Н. Виниченко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения РАН

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

Фактор Ланде электронов проводимости в двумерных структурах может сильно отличаться от такового в объемных материалах как знаком, так и по абсолютному значению. В свою очередь, различные технологические решения роста и дизайна гетероструктур открывают возможности к изменению эффективного  $g$ -фактора, что может быть применено при создании устройств транзисторного типа, где предполагается управление спиновым расщеплением [1]. Малое значение эффективной массы и высокая подвижность носителей заряда являются определяющими параметрами для реализации СВЧ-транзисторов, а большое значение  $g$ -фактора может представлять значительный интерес для спиновой инженерии. Всеми вышеперечисленными свойствами обладают системы на основе InGaAs.

Методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке InP были выращены две метаморфные гетеросистемы  $n$ -In <sub>$x$</sub> Ga <sub>$1-x$</sub> As/InAlAs ( $x=0,90; 0,85$ ) с различным содержанием InAs в твердом растворе, ширина квантовой ямы составляет 14 нм, структуры односторонне легированы дельта-слоем Si через спейсер. Образцы имеют форму холловского мостика. В наклонных магнитных полях были измерены продольная  $R_{xx}$  и холловская  $R_{xy}$ -компоненты тензора магнитосопротивления на постоянном токе  $I=1$  мкА при непрерывной развертке магнитного поля до 13 Тл при фиксированной температуре  $T=1,8$  К. В перпендикулярных магнитных полях из анализа осцилляций Шубникова–де Гааза, классического и квантового эффекта Холла были определены концентрация, подвижность и эффективная масса носителей заряда для двух исследуемых систем:  $n=(4,6; 6,8) \cdot 10^{11}$  см<sup>-2</sup>,  $\mu=(2,8; 20) \cdot 10^4$  см<sup>2</sup>/В·с,  $m^*=(0,040; 0,037)m_0$ .

Существует несколько методов определения эффективного  $g$ -фактора посредством измерения магнитосопротивления. В методе совпадений [2] с помощью наклонного магнитного поля можно управлять соотношением циклотронной энергии  $E_c = \hbar\omega_c$  и энергии зеемановского расщепления  $E_Z = g \cdot \mu_B B$ , и наблюдение выполнения условий  $E_c = E_Z$  (смена фазы осцилляций  $R_{xx}$ ) и  $E_c = 2E_Z$  (удвоение периода осцилляций  $R_{xx}$ ) даст возможность определить значения  $g$ -фактора. Взаимное положение уровней Ландау при фиксированных углах наклонного магнитного поля, иллюстрирующее метод совпадений, схематически показано на вставке к рис. 1. Поведение продольного сопротивления  $R_{xx}$  в минимумах

осцилляций при изменении температуры и наклонного магнитного поля может быть описано активационным законом для малых номеров фактора заполнения [3], что позволяет определить величины щелей между уровнями Ландау с точностью до уширения  $\Gamma$ , зная которые, можно получить  $g^*$ . Начало наблюдения зеемановского расщепления возможно при условии, что расщепление будет больше  $\Gamma$ . Для гетероструктур на основе InAs [3] и GaAs [4] уширение полосы плотности состояний на уровнях Ландау имеет Гауссову форму, зависящую от квантового времени жизни и магнитного поля, что позволяет оценить значение  $g$ -фактора. Измерения при различных углах наклона магнитного поля дают возможность оценить анизотропию  $g$ -фактора электронов.

Экспериментально зафиксированное изменение фазы осцилляций второй производной продольного сопротивления  $R_{xx}$  по магнитному полю в зависимости от фактора заполнения (рис. 1) было проанализировано в рамках метода совпадений. Полученные большие значения эффективного  $g$ -фактора  $|g^*| = 7,5 \div 10,5$  для больших факторов заполнения  $\nu = 12 \div 15$  превосходят таковые, определенные методом электронного спинового резонанса для подобных структур [5, 6], что можно связать с обменным взаимодействием, а также наличием непараболичности закона дисперсии подзон размерного квантования структур на основе InAs. Активационная зависимость продольного сопротивления от угла наклона магнитного поля позволила выявить осциллирующий характер поведения  $g$ -фактора при изменении магнитного поля, качественно согласующийся с результатами теоретической работы [4]. Увеличение содержания In приводит к увеличению значения эффективного  $g$ -фактора. Полученные значения анизотропии  $g_{\parallel}/g_{\perp}$  не превышают единицы.

Данная работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Электрон» Г.р. № 122021000039-4.

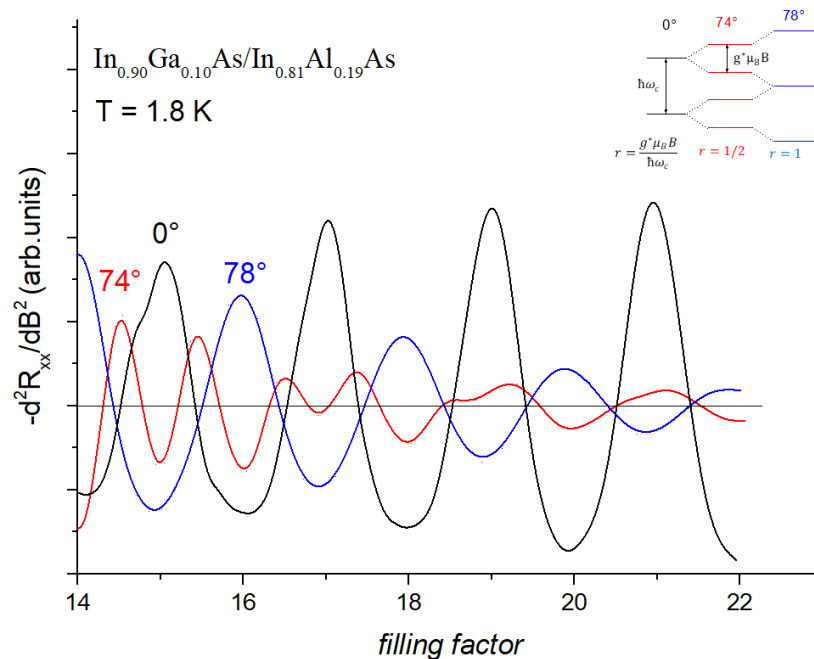


Рис. 1. Зависимость второй производной продольного сопротивления по магнитному полю, взятой со знаком минус, от фактора заполнения при фиксированных значениях углов наклонного поля. На вставке схематично показана эволюция уровней Ландау при изменении угла наклона [6]

## Литература

1. Datta S., Das B. Electronic analog of the electro-optic modulator // Appl. Phys. Lett. 1990. V. 56(7). P. 665–667.
2. Fang F. F., Stiles P. J. Effects of a tilted magnetic field on a two-dimensional electron gas // Phys. Rev. 1968. V. 174. P. 823–828.
3. Usher A., Nicholas R. J., Foxon C. T. Observation of magnetic excitons and spin wave in activation studies of a two-dimensional electron gas // Phys. Rev. B. Condens. Matter. 1990. V. 41. P. 1129–1134.
4. Krishtopenko S. S., Gavrilenko V. I., Goiran M. Theory of  $g$ -factor enhancement in narrow-gap quantum well heterostructures // J. Phys.: Condens. Matter. 2011. V. 23(38):385601.
5. Dobers M., Vieren J. P., Guldner Y., Bove P., Omnes F., Razeghi M. Electron spin resonance of the two-dimensional electron gas Ga<sub>0.47</sub>In<sub>0.53</sub>As–InP heterostructures // Phys. Rev. B. Condens. Matter. 1989. V. 40. P. 8075–8078.
6. Nicholas R. J., Haug R. J., Klitzing K. V., Weimann G. Exchange enhancement of the spin splitting in a GaAs–Ga<sub>x</sub>Al<sub>1-x</sub>As heterojunction // Phys. Rev. B. Condens. Matter. 1988. V. 37. P. 1294–1302.

## Константы магнитокристаллической анизотропии соединений $Y_2(Fe_xCo_{1-x})_{17}$

*А. И. Синкевич, М. Б. Ляхова, Е. М. Семенова, А. Ю. Карпенков*

Тверской государственный университет

Соединения типа  $R_2Co_{17}$  ( $R$  — редкоземельные элементы) являются перспективными материалами для высокоэнергоемких постоянных магнитов с повышенной температурной стабильностью, поскольку характеризуются высокими значениями констант магнитокристаллической анизотропии (МКА), намагниченности насыщения и температур Кюри. Однако составы с некоторыми РЗМ характеризуются неодноосной МКА, что не позволяет использовать их в качестве основы для магнитов. Изменить тип МКА возможно легированием бинарных составов. Соединение  $Y_2Co_{17}$  обладает МКА «легкая плоскость» во всем температурном диапазоне, однако легирование этого состава железом меняет тип магнитокристаллической анизотропии на одноосный. Соединения  $Y_2(Fe_xCo_{1-x})_{17}$  в интервале  $x=0,03\div 0,53$  характеризуются значительными вариациями магнитных свойств, связанными с изменением параметров кристаллической решетки и типа МКА. Количественной характеристикой МКА служат константы магнитокристаллической анизотропии  $K_1$  и  $K_2$  [1, 2]. В данной работе представлены результаты определения и анализа констант МКА по данным магнитных измерений. Методом вибрационного магнитометра были получены полевые зависимости намагниченности в интервале температур  $T=300\div 923$  К параллельно и перпендикулярно оси легкого намагничивания  $c$ . На рис. 1 в качестве примера представлены результаты измерений кривых намагничивания образца с  $x=0,18$  с учетом собственного поля размагничивания образца. Сопоставление кривых намагничивания вдоль легкой и трудной оси позволяет сделать вывод об анизотропии исследуемых образцов. Расчет констант МКА проводился методом Сексмита–Томсона [3]. Построены концентрационные и температурные зависимости констант МКА. Показано, что в интервале концентраций  $x=0,07\div 0,50$  соединения рассматриваемого типа при комнатной температуре характеризуются МКА типа «ось легкого намагничивания», что подтверждается данными о магнитной доменной структуре этих составов [4].

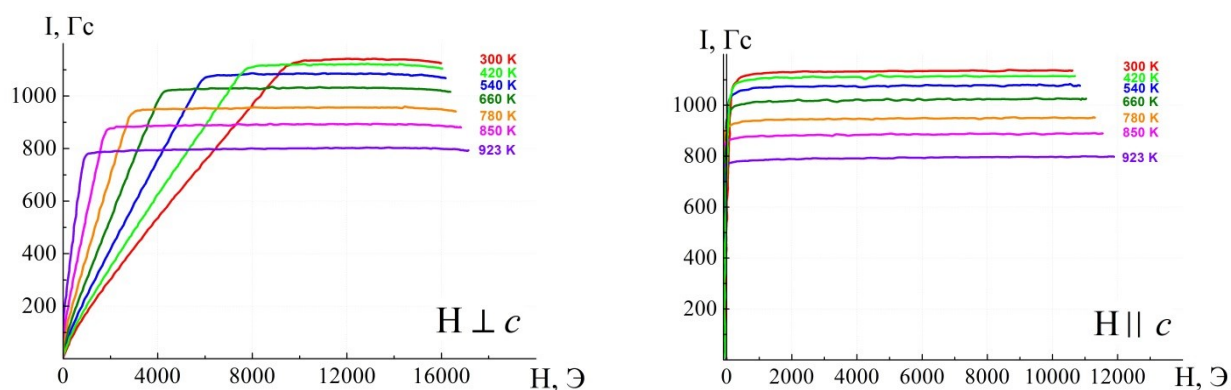


Рис. 1. Полевые зависимости намагниченности монокристалла  $Y_2(Fe_{0.18}Co_{0.82})_{17}$ , измеренные при температурах 300–923 К

### Литература

1. Perkins R. S., Nagel H. The magnetocrystalline anisotropy of  $Y_2(Co_{1-x}Fe_x)_{17}$ // Phys. B. 1975. V. 80. P. 143–152.
2. Chen H., Ho W.-W., Sankar S. G., Wallace W. E. Magnetic anisotropy phase diagrams of  $R_2(Co_{1-x}Fe_x)_{17}$  compounds ( $R=Y, Pr, Sm, Gd, Dy, Er$ )// J. Magn. Magn. Mater. 1989. V. 78. P. 203–207.
3. Sucksmith W., Thompson F. R. S., Thompson J. E. The magnetic anisotropy of cobalt// Proc. R. Soc. London, Ser. A. 1954. V. 225. P. 362–375.
4. Semenova E. M., Lyakhova M. B., Sinkevich A. I., Karpenkov A. Yu., Pastushenkov Y. G. Magnetic domain structure of  $Y_2(Fe_xCo_{1-x})_{17}$  compounds// IEEE Magn. Lett. 2020. V. 11: 2501005.

## Прочность и пластичность двухслойной керамики на основе диоксида циркония

*Г. В. Григорьев, В. М. Васюков, Н. Ю. Ефремова, А. А. Дмитриевский*

Тамбовский государственный университет имени Г. Р. Державина

Композиционная керамика на основе диоксида циркония имеет широкое применение в различных сферах деятельности, начиная от электротехники и медицины, заканчивая авиационной и космической промышленностью. Она обладает термической, химической, радиационной стойкостью в сочетании с высокой вязкостью разрушения и биоинертностью. Одним из ее основных недостатков является хрупкое поведение при комнатных температурах.

В работе [1] показано, что при внесении добавки  $\text{SiO}_2$  (в концентрации порядка 3–5 мол. %) в циркониевую керамику, упрочненную оксидом алюминия (ATZ-керамику), способствует повышению ее вязкости разрушения (на ~70%), предела прочности на сжатие (на ~15%) и появлению запаса пластичности при комнатных температурах, однако при этом наблюдается снижение нанотвердости (на ~10%). В связи с этим целью работы являлось развитие подходов к изготовлению ATZ+ $\text{SiO}_2$ -керамики, обладающей повышенной прочностью и запасом пластичности, с приповерхностным слоем из бескремниевой ATZ-керамики, характеризующейся более высокой нанотвердостью.

Для изготовления образцов использовали два вида порошковых смесей. В обеих смесях концентрации стабилизатора CaO и упрочняющей добавки  $\text{Al}_2\text{O}_3$  сохраняли постоянными (6,5 мол.% и 5 вес.% соответственно). В одну из смесей добавлялся  $\text{SiO}_2$  в концентрации 4 мол.%. Из полученных смесей формовали двухслойные образцы (бескремниевый слой имел толщину ~100 мкм) методом одноосного холодного прессования под нагрузкой 500 МПа и последующего двухстадийного спекания ( $T_1 = 1300^\circ\text{C}$ ,  $T_2 = 1200^\circ\text{C}$ ). Для регистрации  $\sigma$ – $\varepsilon$ -диаграмм (метод одноосного сжатия при комнатных температурах) из цилиндрических образцов вырезали параллелепипеды.

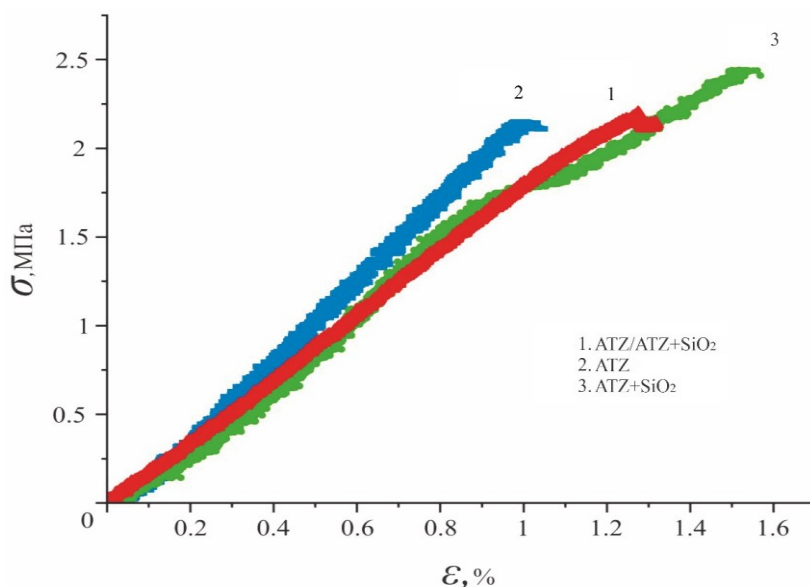


Рис. 1. Показаны  $\sigma$ – $\varepsilon$ -диаграммы, зарегистрированные в процессе одноосного сжатия композиционных керамик на основе диоксида циркония при комнатных температурах

Как следует из данных, представленных на рис. 1,  $\sigma$ – $\varepsilon$ -диаграмма, зарегистрированная при деформации 2-слойной керамики (кривая 1), имеет отклонение от линейной зависимости, характерной для классических керамик, в том числе бескремниевой ATZ-керамики (кривая 2).

Уменьшение угла наклона  $\sigma$ – $\varepsilon$ -диаграммы (кривая 1) свидетельствует о проявлении признаков пластичности исследуемой двухслойной керамики.

Наличие  $\text{SiO}_2$  в основном объеме материала вызывает снижение модуля упругости, что в сочетании с отклонением от упругой деформации приводит к увеличению критической относительной деформации на 30%. С одной стороны, наличие бескремниевых слоев препятствует яркому проявлению пластичности, характерному для ATZ+ $\text{SiO}_2$ -керамики (кривая 3) [2]. Однако, с другой стороны, его присутствие обеспечивает повышение нанотвердости приповерхностного слоя на 10% (рис. 2) [3].

Таким образом, разработанная двухслойная ATZ/ATZ+SiO<sub>2</sub>-керамика обладает нанотвердостью, характерной для ATZ керамик, но при этом имеет запас пластичности при комнатных температурах. Использование предложенного подхода к изготовлению композиционных циркониевых керамик может значительно повысить ресурс изделий, подверженных механическим нагрузкам.

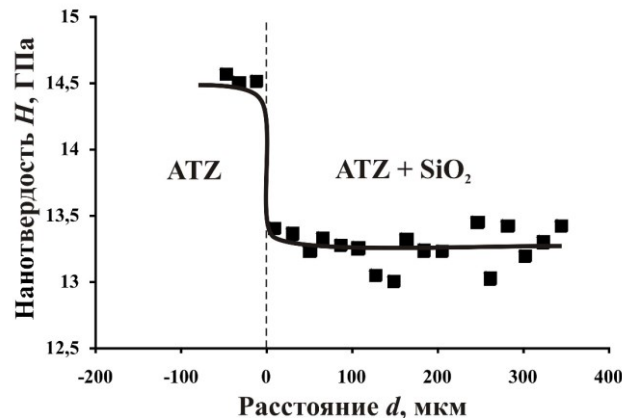


Рис. 2. Зависимость нанотвердости  $H$  от расстояния  $d$  до границы раздела слоев ATZ и ATZ+SiO<sub>2</sub> керамики

Результаты получены с использованием оснащения Центра коллективного пользования научным оборудованием ТГУ имени Г. Р. Державина. Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта по соглашению № 075-15-2021-709 (уникальный идентификатор проекта RF-2296.61321X0037)

### Литература

1. Дмитриевский А. А., Жигачева Д. Г., Тюрин А. И., Ефремова Н. Ю., Григорьев Г. В., Васюков В. М. Влияние примеси SiO<sub>2</sub> на комплекс механических свойств композиционной керамики CaO-ZrO<sub>2</sub>+Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>// Перспективные материалы и технологии. Сб. материалов международного симпозиума. — Витебск: Витебский государственный технол. ун-т, 2019. С. 233–235.
2. Дмитриевский А. А., Жигачева Д. Г., Желтов М. А., Овчинников П. Н., Васюков В. М. Прочность и «пластичность» композиционной керамики на основе диоксида циркония при комнатной температуре//Перспективные материалы и технологии. Материалы международного симпозиума. — Минск: БелГИСС, 2021. С. 190–192.
3. Дмитриевский А. А., Жигачева Д. Г., Григорьев Г. В., Овчинников П. Н. Изменение микротвердости композиционной керамики на границе раздела CaO-ZrO<sub>2</sub>/CaO-ZrO<sub>2</sub>+Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>// Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2022. № 4. С. 30–33.

УДК 538.958

## Исследование температурных характеристик экситонных состояний перовскита CsPbBr<sub>3</sub>:Er<sub>0.1</sub>

С. Н. Терешко

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)  
Институт физики твердого тела РАН

Перовскиты — материалы с составом АВХ<sub>3</sub>, где А и В обозначают катионы, а Х — анион (обычно кислород или галогены), и структурой CaTiO<sub>3</sub>, в последние 10 лет привлекающие к себе пристальное внимание научного сообщества. Все 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 25% 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].

Исследование зависимости оптических свойств полупроводника от температуры позволяет больше узнать об экситонных состояниях и о взаимодействии экситонов с другими квазичастицами в полупро-

воднике. Мног были выполнены измерения поляризованных компонент фотолюминесценции и отражения белого света при различных температурах для определения температурной зависимости положения и ширины люминесцентной линии для экситона.

Исследованные образцы представляли собой монокристалл или несколько скрепленных монокристаллов  $\text{CsPbBr}_3$ , в которых 10% свинца было заменено эрбием. Образец освещался белым светодиодом с непрерывным широким спектром и с локальным максимумом в области 380 нм. Измерения проходили в геометрии отражения. Излучение светодиода проходило через линейный поляризатор, после чего направлялось на образец, после выхода из криостата сигнал проходил через еще один линейный поляризатор. Сигналы фотолюминесценции и отражения снимались при помощи монохроматора с хорошим ( $\sim 130$  мкэВ) спектральным разрешением. Измерения выполнялись в температурном диапазоне от 2 К до 42 К.

Пример измеренных спектров фотолюминесценции и отражения в отсутствие поляризационных элементов 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  $1 \div 1,5$  мэВ в зависимости от образца. Кривая отражения (рис. 1б) имеет s-образную форму, характерную для полупроводников в области их экситонного резонанса. Пик в области 2,32 эВ на рис. 1б является тем же фотолюминесцентным пиком, его появление обусловлено максимумом в фиолетовой области спектра излучения белого светодиода.

Благодаря схеме с двумя поляризаторами, из данных, в которых смешались сигналы фотолюминесценции и отражения, удалось получить отдельно оба сигнала. На рис. 2 изображены результаты температурных измерений в диапазоне от 7 до 42 К для сигналов фотолюминесценции (рис. 2а) и отражения (рис. 2б). Спектры отражения демонстрируют незначительные изменения формы и ширины резонансных кривых, положение экситонного уровня при этом растет сильно нелинейно, на участке от 7 до 27 К линия сдвигается вверх незначительно ( $\sim 350$  мкэВ) по сравнению со сдвигом линии на участке от 27 до 42 К ( $\sim 4$  мэВ). Положение центров масс спектров фотолюминесценции демонстрирует такой же рост, однако при этом заметны относительное уменьшение интенсивности, уширение линии вместе с изменением их формы.

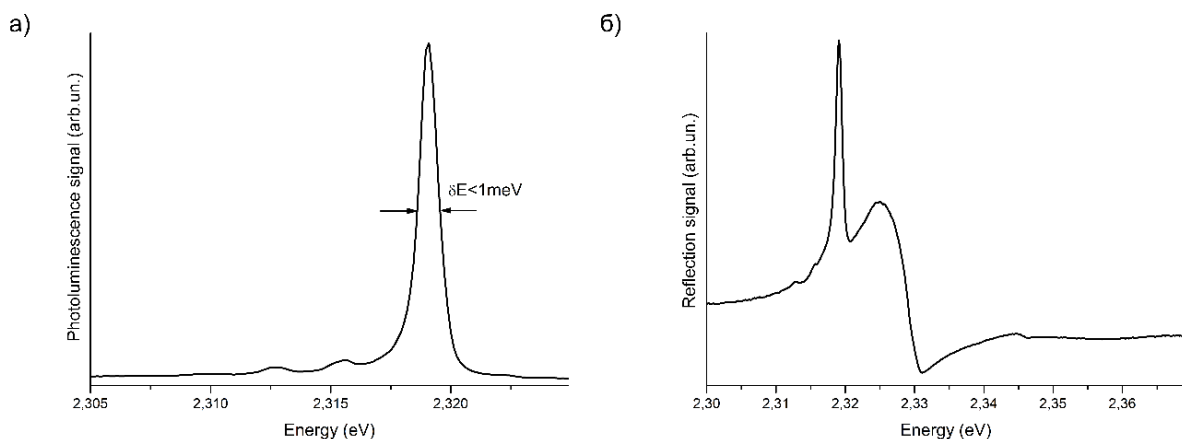


Рис. 1. Фотолюминесцентный пик с энергией 2,319 эВ и шириной до 1 мэВ (а); s-образная кривая отражения от одной из граней кристалла  $\text{CsPbBr}_3:\text{Er}_{0.1}$  (б). Узкий пик в районе 2,32 эВ соответствует линии люминесценции

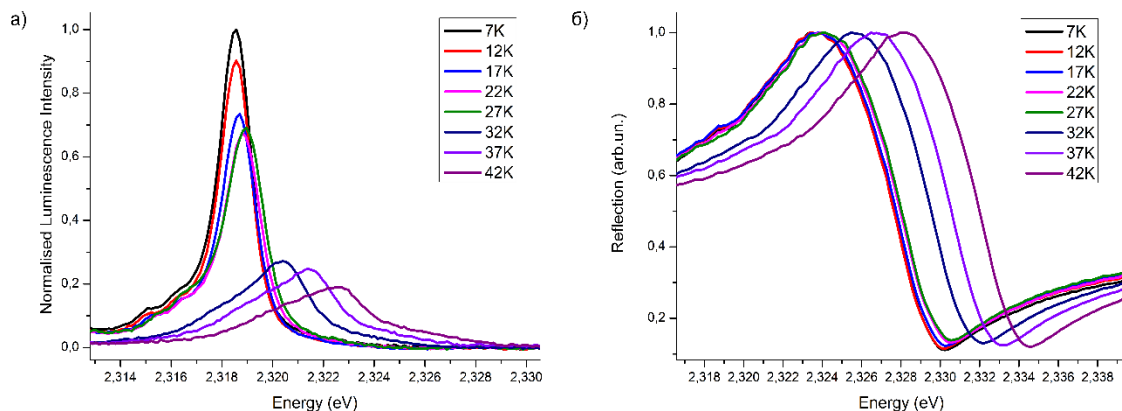


Рис. 2. Нормированные спектры фотолюминесценции, полученные в диапазоне температур от 7 до 42 К (а); нормированные спектры отражения от грани *ac*, полученные в диапазоне температур от 7 до 42 К (б)

Образцы были синтезированы в лаборатории «Фотоактивные нанокompозитные материалы» СПбГУ. Выражаю благодарность В. Д. Кулаковскому и А. А. Демневу за обсуждение результатов и А. В. Емелину за предоставленные образцы.

### Литература

1. Yang T. [et al.] One-stone-for-two-birds strategy to attain beyond 25% perovskite solar cells // Nat. Commun. 2023. V. 14: 839.
2. Pan G. [et al.] Doping lanthanide into perovskite nanocrystals: highly improved and expanded optical properties // Nano Lett. 2017. V. 17(12). P. 8005–8011.

УДК 691.175.2

## Полимерные композиционные материалы на основе фотополимерных смол, модифицированных малослойным графеном, полученным в условиях СВС

С. И. Титова<sup>1</sup>, А. А. Возняковский<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский технологический институт (технический университет)

<sup>2</sup>Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН

Материаловедение активно развивается в двух фундаментальных направлениях: нанотехнологии и 3D-печать. В данной работе было предложено совместить эти направления, используя графеновые наноструктуры и метод цифровой обработки светом (Digital Light Processing — DLP), который основан на послойном отверждении фотополимерной смолы под воздействием света. DLP-метод позволяет получать изделия с высокой точностью, малой шероховатостью и меньшей усадкой за относительно короткое время. Однако изделия из фотополимерных смол характеризуются низкими значениями прочностных характеристик, что не позволяет использовать их во множестве отраслей. Перспективным способом улучшения свойств изделий из фотополимерных смол является использование полимерных композиционных материалов. Сочетание разнородных веществ (матрицы и наполнителя) приводит к созданию нового материала (композита), свойства которого количественно и качественно отличаются от свойств каждого из его составляющих. Варьированием их соотношения можно получать широкий спектр материалов с требуемым набором прочностных и теплофизических свойств. Для улучшения свойств изделий исследователи активно добавляют в полимерные матрицы графеновые наноструктуры, что обусловлено их рекордными характеристиками. Однако использование графеновых наноструктур не всегда приводит к ожидаемому повышению свойств конечных композитов из-за наличия различных дефектов в графеновых наноструктурах.

Целью данной работы является изучение влияния модифицирующих добавок малослойного графена (МГ), полученного в условиях самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС), на прочностные и теплофизические характеристики изделий, изготовленных DLP-методом 3D-печати.

В данной работе в качестве матрицы для создания композитов использовалась прозрачная фотополимерная смола (ФС) марки Anycubic (Китай), которая по данным производителя состоит из полиуретан акрилата (30–60%), акрилата (10–40%) и фотоинициатора (2–5%). В качестве наполнителя был взят МГ, полученный в условиях СВС из циклического биополимера крахмала (ч. д. а.) и окислителя нитрата аммония (ч. д. а.) в соотношении 1 : 1 [1]. Важным преимуществом МГ, синтезированного в условиях СВС, является отсутствие дефектов Стоуна–Уэйлса, практически неизбежных при синтезе другими методами, поэтому использование этого наполнителя позволяет значительно улучшать комплекс прочностных и теплофизических свойств композитов [2]. Модифицирование ФС проводилось путем последовательного добавления равномерных порций МГ в чистую смолу, нагретую до 50°C, при постоянном перемешивании верхнеприводной мешалки (500 об/мин). Концентрация добавок составляла от 0,25 до 4 масс.%. Полученную суспензию выдерживали в ультразвуковой ванне в течение 1 ч при температуре 50°C до получения стабильной суспензии, после чего модифицированную фотополимерную смолу охлаждали до комнатной температуры, помещали в DLP-принтер Anycubic Photon S (Китай) и изготавливали образцы необходимых размеров для дальнейших измерений. Параметры 3D-печати были следующими: длина волны отверждения 405 нм, толщина слоя засветки 50 мкм, время засветки 6 с. Полученные образцы подвергали постобработке с оптимальными условиями ее проведения.

Измерения твердости по Бринеллю проводили на твердомере Метротест ИТБ-3000-АМ (РФ). Измерения прочности на изгиб осуществляли на гидравлическом прессе ПМ-МГ4 (РФ) по ISO 178:2010.

Измерения ударной вязкости по Шарпи были получены на маятниковом копере КММ-50 (РФ) по ISO 179-1 : 210. Измерения теплопроводности проводились по методу лазерной вспышки при 25°C на установке DFX-200 (США).

На рис. 1 изображены диаграммы зависимостей прочностных и теплофизических характеристик изделий от концентрации добавки малослойного графена.

В результате удалось повысить твердость (*a*) и прочность на изгиб (*б*) в 2 раза, ударную вязкость (*в*) в 3 раза и теплопроводность (*г*) при 25°C в 6 раз при концентрации МГ 2 масс. % (см. рис. 1). При дальнейшем увеличении концентрации МГ до 4 масс. % происходит ухудшение прочностных и теплофизических характеристик. Частицы МГ, синтезированные в условиях СВС-процесса, показали себя как эффективные наполнители, способные значительно повысить комплекс прочностных и теплофизических свойств полимерных композиционных изделий, изготовленных DLP-методом 3D-печати. В ходе сравнительного испытания с использованием восстановленного оксида графена было установлено, что отсутствие дефектов Стоуна–Уэйлса значительно повышает эффективность МГ в качестве модифицирующей добавки при создании полимерных композитов. Полученные результаты позволяют рассчитывать на расширения спектра применения изделий, полученных DLP-методом 3D-печати, в таких областях, как приборостроение (в качестве материала корпусов).

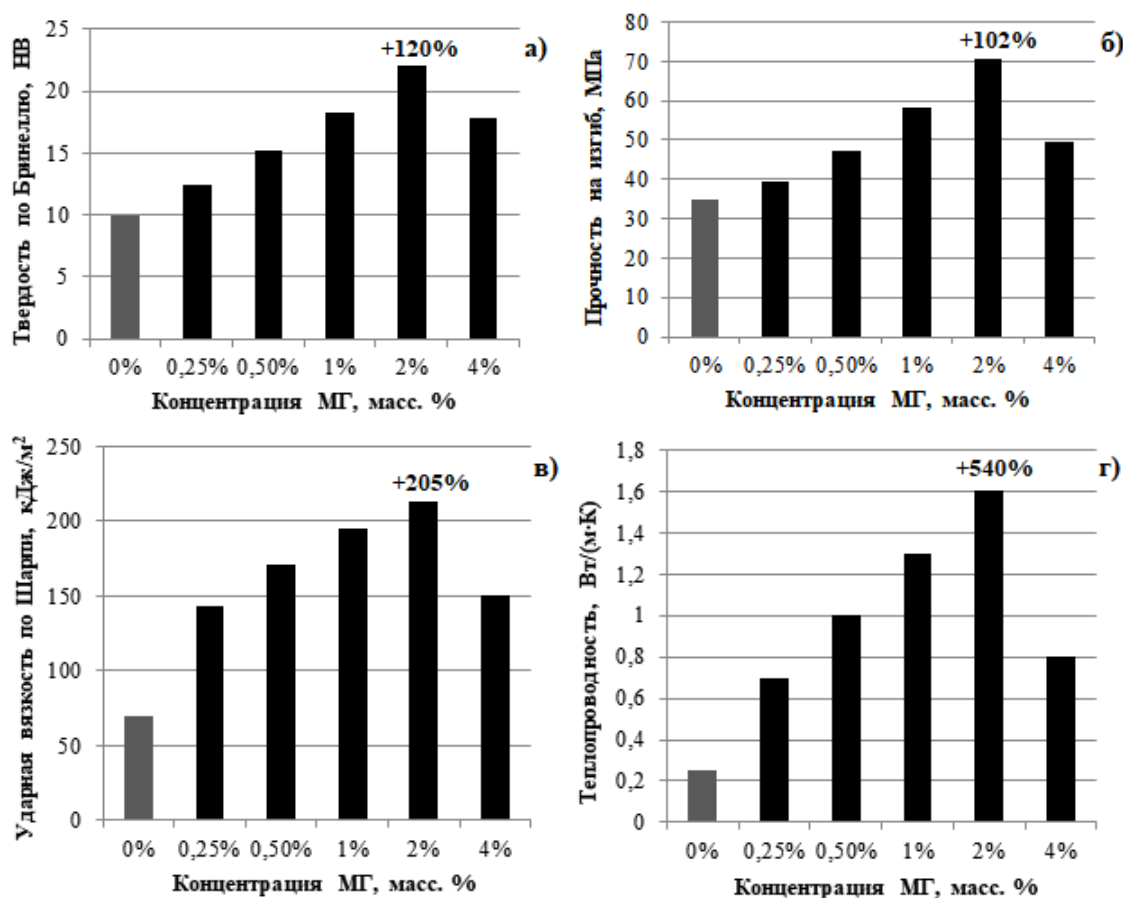


Рис. 1. Диаграммы зависимостей прочностных (*a*, *б*, *в*) и теплофизических (*г*) характеристик изделий от концентрации добавки малослойного графена

### Литература

1. *Voznyakovskii A., Vozniakovskii A., Kidalov S.* New Way of synthesis of few-layer grapheme nanosheets by the self propagating high-temperature synthesis method from biopolymers//Nanomaterials. 2022. V.12(4):657. DOI: 10.3390/nano12040657.
2. *Voznyakovskii A., Neverovskaya A., Vozniakovskii A., Kidalov S.* A Quantitative chemical method for determining the surface concentration of Stone–Wales defects for 1D and 2D carbon nanomaterials//Nanomaterials. 2022. V. 12(5):883. DOI: 10.3390/nano12050883.



## Низкоразмерный органический проводник $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Cl<sub>2</sub> — беспорядок в структуре и его влияние на проводящие свойства

Э. И. Хасанова, А. В. Кузьмин

Институт физики твердого тела имени Ю. А. Осипяна РАН

Металлическая проводимость в низкоразмерных органических кристаллах на основе плоских  $\pi$ -сопряженных молекул BEDT-TTF (или ET) реализуется за счет их особой кристаллической структуры: слоистой укладки донорных молекул [1] с относительно большим перекрытием фронтальных молекулярных орбиталей (МО). Благодаря высокой степени взаимодействия соседних молекул, в таких слоях могут образовываться узкие энергетические зоны электронных состояний. Донорные слои, как правило, чередуются со слоями из сильных акцепторов, анионов, способных «забрать» часть электронов из донорного слоя. В результате такой перебалансировки заряда верхняя зона оказывается частично заполненной, в результате может реализоваться металлическое состояние. При этом электроны, локализованные в анионном слое, в проводимости не участвуют, а носителями тока являются электроны донорных слоев. Проводимость такого типа носит квазидвумерный характер, а анизотропия проводимости (соотношение проводимостей вдоль слоев и поперек слоев) составляет  $10^3 \div 10^4$ .

Среди представителей широкого класса ET-проводников соль  $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Cl<sub>2</sub> (или сокращенно  $\kappa$ -Cl) выделяется своими нетривиальными физико-химическими свойствами. Соединение может быть получено в двух фазовых состояниях: моттовского диэлектрика и так называемой  $\kappa'$ -Cl фазы, которая является металлом при нормальных условиях и переходит в сверхпроводящее состояние при  $T_c = 11,5$  К [2]. Кристаллы  $\kappa$ -Cl и  $\kappa'$ -Cl имеют похожую слоистую структуру [3], причем молекулы ET в проводящем слое димеризуются и образуют треугольную решетку, что является характерным признаком  $\kappa$ -фазы. Среди необычных свойств можно отметить скачкообразное изменение сопротивления кристаллов  $\kappa$ -Cl в зависимости от приложенного напряжения, что позволяет говорить о возможности создания логических элементов на их основе [4]. Согласно литературным данным, проводящие свойства соли  $\kappa$ -Cl сильно зависят от деталей внутренней структуры катионных и анионных слоев. Существует ряд работ, предполагающих связь проводимости со структурным беспорядком в этиленовых группах молекул ET [4]. Считается, что данный тип беспорядка имеет термоактивационную природу. Изначально, при комнатной температуре, хвосты молекул ET разупорядочены по двум позициям — заслоненная и заторможенная, в соотношении 0,8 : 0,2. При медленном охлаждении до азотных температур заселенность заслоненной позиции стремится к 1,0, и беспорядок становится трудно различим методами рентгеноструктурного анализа (РСА).

В данной работе методом РСА были исследованы особенности температурного поведения беспорядка в этиленовых группах ET-молекул в кристаллах  $\kappa$ -Cl в интервале температур 100 ÷ 300 К. В рамках этого интервала были экспериментально уточнены параметры кристаллической решетки с шагом по температуре в 10 К. Исходя из полученных данных, были построены кривые температурного поведения параметров  $a(T)$ ,  $b(T)$ ,  $c(T)$  и объема  $V(T)$  элементарной ячейки. Анализ температурных зависимостей позволил обнаружить особенность в области 180 ÷ 240 К, связанную с скачкообразным изменением коэффициента термического расширения. Данная особенность и раньше наблюдалась для некоторых соединений ET; по-видимому, она связана с влиянием анионного слоя [1], однако вопрос о причинах ее возникновения до сих пор остается дискуссионным. При температурах 289, 241, 194, 147 и 112 К были проведены полные рентгendifрационные эксперименты с последующим рентгеноструктурным анализом (структура соли  $\kappa$ -Cl изображена на рис. 1а). Таким образом, нами были получены структурные данные высокого разрешения с факторами достоверности  $R_1 \leq 5\%$ , допускающие применение расчетных полуэмпирических методов.

Детальный кристаллохимический анализ структурных данных позволил установить температурное поведение беспорядка в концевых этиленовых группах ET-молекул (рис. 1б).

Температурные зависимости параметра заселенностей этиленовых групп (рис. 1в) указывают на то, что возможное полное упорядочение в структуре катионного слоя достигается в интервале 44 ÷ 64 К, при этом в области 180 ÷ 240 К на графиках заселенностей наблюдается такая же особенность, как и на графиках параметров ячейки.

На основе полученных структур методами квантово-химического моделирования с использованием полуэмпирического расширенного метода Хюккеля было проанализировано, как структура электронных состояний в катионном слое соединения зависит от беспорядка данного типа. В частности,

результаты расчетов позволили установить, как плотность состояний, энергия Ферми и зарядовое распределение внутри димеров меняется при перераспределении заселенностей концевых групп. Были выявлены основные типы диспропорционирования заряда между молекулами в димере. Показано, что неравномерное распределение электронной плотности в димере  $ET_2$  может быть связано с «переключением» ориентаций  $-C_2H_4$ -концевых групп и локальным понижением симметрии, а именно, нарушением центра инверсии внутри димера  $ET_2$ .

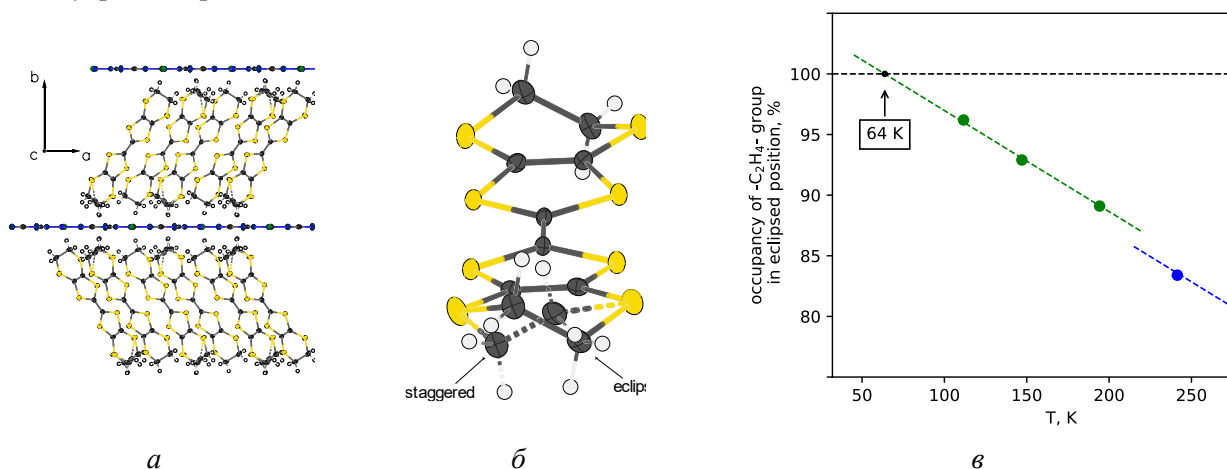


Рис. 1. Структура кристаллов соли  $\kappa$ -Cl: *a* — упаковка проводящих и изоляционных слоев; *б* — две ориентации этиленовых групп молекул ET: заторможенная (staggered) и заслоненная (eclipsed), заселенность заслоненной (eclipsed) конфигурации в зависимости от температуры

### Литература

1. Прохорова Т. Г., Ягубский Э. Б. Органические проводники и сверхпроводники на основе катион-радикальных солей бис(этилентидио)тетрафульвалена с супрамолекулярными трис(оксалато)металлатными анионами // Успехи химии. 2017. Т. 86. № 2. С. 164–180.
2. Yagubskii E. B. [et al.] Superconductivity at Normal Pressure in  $\kappa$ -(BEDT-TTF) $_2$ Cu[N(CN) $_2$ ]Cl $_2$  Crystals // JETP Letter. 2005. V. 82(2). P. 93–95.
3. Zverev V. N. [et al.] Transport properties and structural features of the ambient-pressure superconductor  $\kappa'$ -(BEDT-TTF) $_2$ Cu[N(CN) $_2$ ]Cl $_2$  // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. № 10: 104504.
4. Huang Y., Hu Y., Ren S. Low-power anisotropic molecular electronic memristors // Appl. Mater. Today. 2022. V. 29: 101569.

УДК 538.9

### О самоактивации связей полимеров с неорганикой при деформировании их композиций

*И. С. Цебрук, Н. В. Классен, В. В. Кедров, А. П. Покидов*

Институт физики твердого тела имени Ю. А. Осипяна РАН

При нескольких видах деформационной обработки композиций полистирола с неорганическим материалами обнаружены изменения колебательных спектров, рентгеновской дифракции, гетерогенного массопереноса, внутренней наноструктуры. Это свидетельствует о формировании новых типов связей органика–неорганика, активированных деформированием.

Интерес к исследованиям физических свойств органических материалов заметно возрос в 1960-х гг. после выхода теоретических работ В. Литтла, показавших возможность существенного повышения температуры сверхпроводящего перехода в органических проводниках за счет особо сильного электрон-фонного взаимодействия в них [1, 2]. Далее стали расширяться исследования гибридных материалов, где в наноразмерных масштабах формировались композиции из органических и неорганических компонентов [3, 4]. В этих ситуациях в заметной части объема такой композиции перемешиваются электронные состояния контактирующих органики и неорганики, что перспективно для образования качественно новых свойств — например, в солнечных батареях. В наших работах по формированию нанокомпозитов из органических люминофоров и неорганических сцинтилляторов были представлены новые сцинтилляци-

онные материалы с рекордными сочетаниями эффективности и быстродействия высвечивания, актуальными для создания особо чувствительных радиационных детекторов [5, 6]. В наноконпозициях органика–неорганика важное значение имеет качество связей между атомами этих компонентов — как при формировании новых электронных состояний, так, например, при транспортировке лекарственных веществ внутри организма наночастицами [7, 8].

При исследованиях процессов взаимодействия полимерных молекул с неорганическими кристаллами как диэлектрической, так и металлической природы мы обнаружили ряд фактов, указывающих на деформационную активацию сильных межатомных связей органика–неорганика. К таким фактам относятся следующие.

1. В спектрах инфракрасного поглощения пленок полистирола с введенными в них наночастицами сульфата или иодида цезия в областях колебаний и бензольных колец полистирола и линейных С–Н-связей наблюдаются изменения, свидетельствующие о модификации структуры этих молекул (рис. 1).

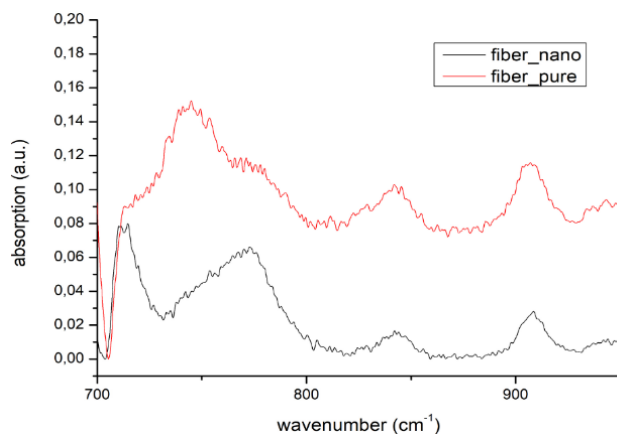


Рис. 1. ИК-спектроскопия взаимодействия наночастиц иодида цезия с полистиролом в областях колебаний и бензольных колец. Верхняя кривая — спектр чистого полистирола, нижняя — с наночастицами

2. В микроволокнах, сформированных вытягиванием из раствора полистирола в бензоле с введенными в него наночастицами иодида цезия, электронная микроскопия обнаруживает наноканалы, выходящие изнутри (рис. 2, слева). Мы считаем их результатом активного взаимодействия наночастиц с полимерными молекулами, приводящим к ускоренному испарению растворителя.

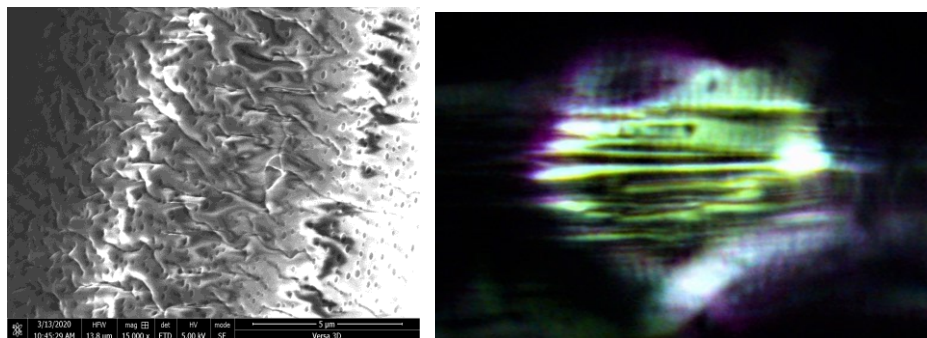


Рис. 2. Слева: электронная микроскопия волокон с наполнителем из наночастицами иодида цезия. Справа: микрорасщепление волокна из полистиролла с введенным в него бромидом лантана

3. При формировании аналогичным вытягиванием волокон полистирола из его раствора с микро-частицами бромида лантана и электронная, и оптическая микроскопии выявляют резкое измельчение этих частиц и преобразование их в нити, ориентированные вдоль волокна (рис. 2, справа).

4. Рентгенофазовый анализ микроволокон полистирола с частицами бромида лантана показывает, что узкие линии рентгеновской дифракции кристаллического бромида лантана превращаются в широкие максимумы интенсивности с серединами на месте бывших линий.

5. При шариковой обкатке поверхности кристаллов иодида цезия и хлорида калия с нанесенным на нее раствором полистирола в бензоле наблюдается anomalно глубокое и anomalно быстрое проникновение полистирола в глубину приповерхностного слоя кристаллов. Глубины такого внедрения достигают сотни и более микрон за суммарное время обкатки всего 20–30 мин. При этом внедряемый обкаткой

полистирол формирует тонкие и прямые микронити, уходящие в глубину перпендикулярно обкатываемой поверхности. Тем самым деформирование индуцирует всасывание полистирола кристаллом.

В представленной выше при нескольких видах воздействий на композиции полистирола с неорганическими материалами деформационной активации их взаимного связывания серьезную роль играет, на наш взгляд, протяженность полимеров. За счет нее энергия, выделяемая при связывании какого-либо участка молекулы с вошедшим в контакт атомом неорганики, не рассеивается в окружающее пространство, а распространяется вдоль полимерной цепочки в виде, например, экситонной или фононной волны. Такой перенос энергии связи может индуцировать преодоление активационных барьеров для последовательного связывания соседних участков полимера с контактирующими компонентами неорганики.

### Литература

1. *Little W. A.* Possibility of synthesizing superconductors // *Phys. Rev. A.* 1964. V. 134. P. 1416–1424.
2. *Shrivastava S. K.* Superconductivity in Organic Materials // *Journal of Emerging Technologies and Innovative Research.* 2019. V. 6. P. 45–55.
3. *Gratzel M.* Photoelectrochemical cells // *Nature.* 2001. V. 414. P. 338–344.
4. *Sanchez C., Soler-Ilia G.* Hybrid Materials (Organic–Inorganic) // *Encyclopedia of Chemical Processing.* — Abingdon: Taylor and Francis, 2006. P. 1267–1280.
5. *Классен Н. В.* [и др.] Сцинтилляционные волокна и наносцинтилляторы для улучшения пространственного, спектрометрического и временного разрешения // *Изв. РАН. Сер. физическая.* 2009. Т. 73. № 10. С. 1451–1456.
6. *Cebрук I. S., Pokidov A. P., Kedrov V. V., Klassen N. V.* Dynamical forming and applications of nanocomposites from organic and inorganic components // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2019. V. 1309:012002.
7. *Bennet T. D.* [et al.] Interplay between defects, disorder and flexibility in metal — organic frameworks // *Nat. Chem.* 2017. V. 9. P. 11–13.
8. *Patra J. K.* [et al.] Nano based drug delivery systems: recent developments and future prospects // *J. Nanobiotechnol.* 2018. V. 16(1): 71.

УДК 537.622.6

### Магнитные свойства замещенных ферритов на основе Co, Ni и Zn

*Е. Д. Шипкова<sup>1</sup>, Н. С. Перов<sup>1</sup>, Д. П. Шерстюк<sup>2</sup>, Д. А. Винник<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

<sup>2</sup>Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)

Одними из наиболее перспективных магнитных материалов являются ферриты, поскольку они включают в себя два класса материалов — магнитотвердые и магнитномягкие. Благодаря многообразию магнитных свойств, они обладают широким диапазоном приложений. Они используются в высокочастотных устройствах и магнитном хранении информации высокой плотности [1, 2]. Кроме того, за счет низкой себестоимости и безвредности для окружающей среды ферриты было предложено использовать в системах очистки воды [3]. Возможно также и применение ферритов в области медицины для улучшения изображений в качестве контрастного агента для магнитно-резонансной томографии и для адресной доставки лекарств [4]. Для увеличения функциональности материалов представляют интерес ферриты, магнитные свойства которых можно изменять посредством легирования их атомами других элементов. При малом шаге степени замещения появляется возможность плавного изменения магнитных свойств под заданные требования. Магнитные свойства таких ферритов могут изменяться достаточно сильно, переводя материал из магнитотвердого состояния в магнитномягкое или наоборот. В настоящей работе изучались ферриты со структурой шпинели. Шпинели широко распространены в природе, а ферримагнетизм во многих из них наблюдается уже при комнатных значениях температур.

Исследованные образцы представляют собой порошки, полученные методом твердофазного синтеза в Лаборатории роста кристаллов Южно-Уральского государственного университета.

Ниже представлены результаты исследования магнитных свойств ферритов-шпинелей на основе Ni, Zn и Co. Образцы были разделены на три серии, в каждой из которых фиксировалась концентрация кобальта, а концентрации двух других элементов изменялись в определенных пределах:  $\text{Co}_{0,1}\text{Zn}_{0,9-x}\text{Ni}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ ;  $\text{Co}_{0,2}\text{Zn}_{0,8-x}\text{Ni}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ ;  $\text{Co}_{0,4}\text{Ni}_{0,6-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ . Измерения были проведены при помощи вибрационного магнетометра VSM серии Lakeshore 7400 в полях до 16 кЭ и в диапазоне температур от 100 до 1000 К.

Были получены зависимости магнитных свойств образцов (коэрцитивная сила и намагниченность насыщения при разных температурах) от концентрации замещающих компонентов. Также из

температурных зависимостей намагниченности для произвольно взятых образцов была определена температура Кюри (в поле 16 кЭ). Значения температуры Кюри были определены при помощи линейной аппроксимации зависимости обратной величины восприимчивости образца от температуры.

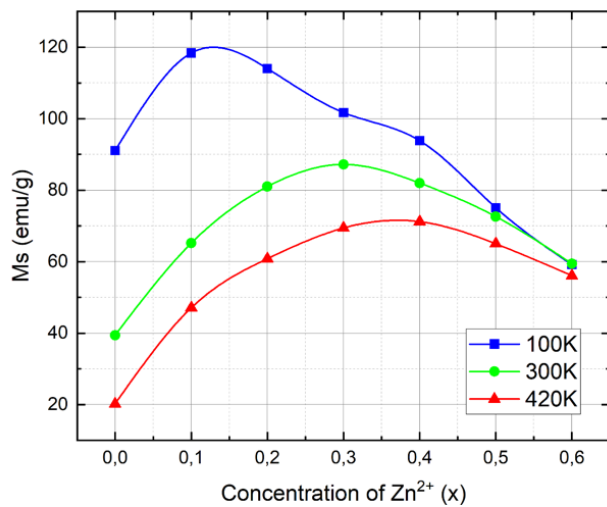


Рис. 1. Концентрационная зависимость  $M_s$  для феррита  $\text{Co}_{0,1}\text{Zn}_{0,9-x}\text{Ni}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$

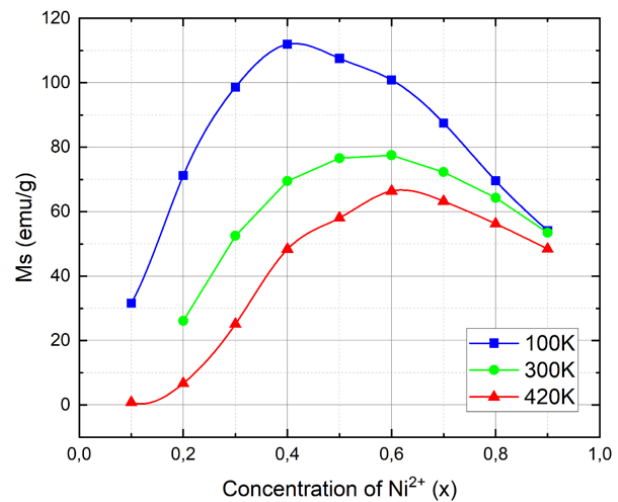


Рис. 2. Концентрационная зависимость  $M_s$  для феррита  $\text{Co}_{0,4}\text{Ni}_{0,6-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$

Полученные результаты коэрцитивной силы ( $H_c$ ) для всех трех серий имеют большую конечную величину, что подтверждается увеличением содержания  $\text{Co}$  при переходе от одной серии к другой. Рост коэрцитивной силы с увеличением концентрации замещающего элемента для каждой серии образцов может быть обусловлен перераспределением катионов между октаэдрическими (B) и тетраэдрическими (A) позициями шпинели. Однако при понижении температуры (при 100 K) наблюдается резкий рост  $H_c$ . Это можно объяснить уменьшением тепловых флуктуаций магнитных моментов при понижении температуры. Зависимость намагниченности насыщения ( $M_s$ ) для каждой серии имеет общий характер — с увеличением доли замещающих атомов  $M_s$  растет, затем при определенной концентрации достигает максимума и спадает. Для двух серий, где замещающим элементом является  $\text{Ni}$ , максимумы  $M_s$  достигаются при одной и той же концентрации  $\text{Ni}$  ( $x=0,4$ ) (рис. 1), а для серии с  $\text{Zn}$ -замещающим элементом, максимум наблюдается при меньшей доле замещения цинком ( $x=0,1$ ) (рис. 2). Сдвиг максимумов может быть объяснен разной величиной магнитного момента замещающих атомов. Замещение ионами  $\text{Zn}$  с магнитным моментом  $0\mu_B$  способствует более раннему спаду намагниченности, чем ионами  $\text{Ni}$  ( $2\mu_B$ ). Общий характер зависимости намагниченности насыщения от концентрации замещающих атомов может быть объяснен перераспределением катионов по (A) и (B) позициям шпинели. Так как ферримагнетизм определяется межподрешеточным (AB) взаимодействием, то при увеличении доли замещающих элементов AB-взаимодействие растет, вследствие чего увеличивается  $M_s$ . Однако при достижении определенной концентрации замещающего элемента AB-взаимодействие уменьшается и наблюдается спад намагниченности.

## Литература

1. Устинов А., Кочемасов В., Хасьянова Е. Ферритовые материалы для устройств СВЧ-электроники. Основные критерии выбора // Электроника НТБ. 2015. № 7. С. 86–92.
2. Kurian M., Thankachan S. Structural diversity and applications of spinel ferrite core — Shell nanostructures — A review // Open Ceram. 2021. V. 8: 100179.
3. Reddy D. H. K., Yun Y. S. Spinel ferrite magnetic adsorbents: Alternative future materials for water purification? // Coord. Chem. Rev. 2016. V. 315. P. 90–111.
4. Shi Z. [et al.] Mesoporous superparamagnetic cobalt ferrite nanoclusters: Synthesis, characterization and application in drug delivery // J. Magn. Mater. 2020. V. 498: 166222.

## Анализ структуры Джозефсоновского магнитного туннельного перехода: от классического до квантового приближения.

В. В. Юрлов<sup>1</sup>, К. А. Звездин<sup>1,2</sup>, А. К. Звездин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт общей физики имени А. М. Прохорова РАН

Рассмотрена классическая динамика магнитного момента в легкоплоскостном магнетике под воздействием импульса спинового тока, что исследовалось ранее в работе [1]. Объектом исследования является изучение возможности перехода к квантовому режиму в легкоплоскостном магнитном туннельном переходе. Получены эффективный Лагранжиан и Гамильтониан магнитного туннельного перехода и показан их математический изоморфизм с задачей о квантовых переходах Джозефсона. Получены границы применимости, при которых возможно рассмотрение макроскопических параметров как квантово-механических операторов. Проанализированы допустимые величины и длительность импульса спинового тока, при которых также возможен квантовый подход (см. рис. 1). Получены характерные геометрические параметры магнитного туннельного перехода для реализации квантового приближения.

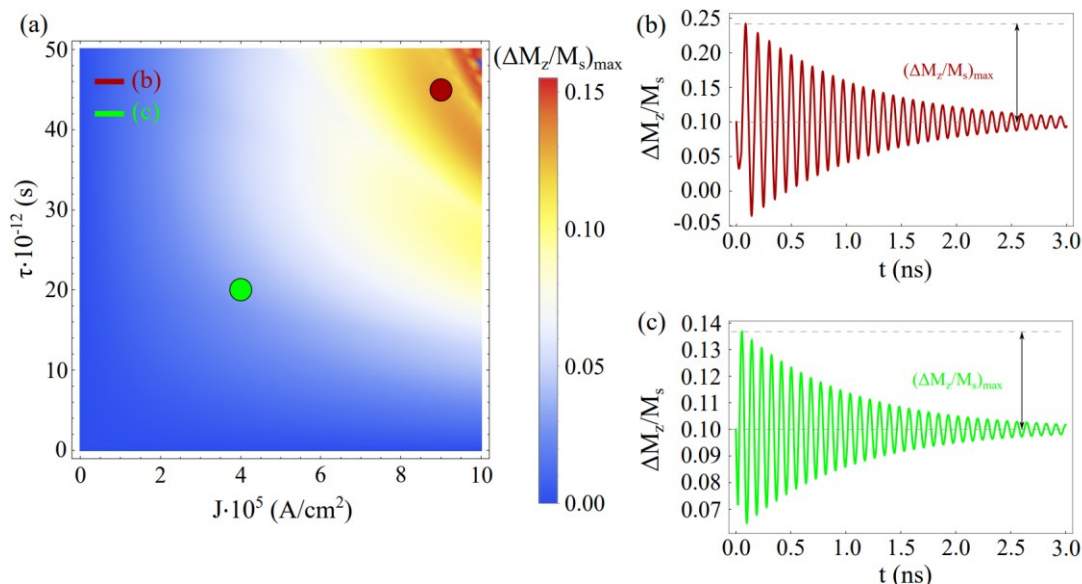


Рис. 1. Диаграмма, демонстрирующая максимальное отклонение магнитного момента от положения равновесия системы (a); осцилляции магнитного момента вблизи положения равновесия (b, c)

В результате, при низких температурах и слабой диссипации в магнитной системе могут проявляться квантовые свойства [1]. Исходя из анализа Лагранжиана, при различных объемах магнитной пленки могут быть реализованы различные аналоги Джозефсоновских кубитов: зарядовый, потоковый и трансмон [2, 3]. Квантовые эффекты, связанные с макроскопической динамикой в Джозефсоновском переходе, могут быть описаны, если заряд и фазу понимать как операторы обобщенного импульса и координаты соответственно. В нашем случае данными величинами являются проекция намагниченности на направление, перпендикулярное плоскости магнетика (или полярный угол), и азимутальный угол соответственно. Описанная модель позволяет получить аналоги сверхпроводящих кубитов на основе магнитных туннельных переходов.

Работа выполнена при поддержке РНФ № 22-12-00367.

### Литература

1. Звездин А. К. Классические и квантовые эффекты в динамике мезоскопического магнита, индуцированные спиновым током // ЖЭТФ. 2002. Т. 122. № 4(10). С. 879–885.
2. Kringhøj A. [et al.] Anharmonicity of a superconducting qubit with a few-mode Josephson junction // Phys. Rev. B. V. 97(6): 060508.
3. Riste D. [et al.]. Millisecond charge-parity fluctuations and induced decoherence in a superconducting transmon qubit // Nature Commun. 2013. V. 4(1): 1913.

## Поведение циркониевой керамики, упрочненной оксидом алюминия, при различных скоростях деформации одноосным сжатием

*П. Н. Овчинников, В. М. Васюков, Н. Ю. Ефремова, А. А. Дмитриевский*

Тамбовский государственный университет им. Г. Р. Державина

Обычно при комнатных температурах керамика ведет себя как хрупкий материал. Однако коллективом Дж. Шевалье [1] была обнаружена неупругая деформация при испытании методом 4-точечного изгиба  $\text{Ce-TZP-Al}_2\text{O}_3\text{-SrAl}_{12}\text{O}_{19}$ -керамики. Нами была обнаружена пластическая деформация  $\text{Ca-ATZ-SiO}_2$ -керамики (циркониевой керамики, упрочненной оксидом алюминия, с добавкой диоксида кремния) в условиях одноосного сжатия при комнатной температуре [2]. Предполагается, что механизмом пластической деформации в обоих ее проявлениях является тетрагонально-моноклинное фазовое превращение диоксида циркония. Известно, что скорость нагружения может оказывать влияние на параметры деформации, например на соотношение упругой и пластической деформации [3]. В связи с этим работа была нацелена на оценку влияния скорости деформации на качественные и количественные особенности  $\sigma$ - $\varepsilon$  диаграмм, зарегистрированных в процессе одноосного нагружения  $\text{Ca-ATZ-SiO}_2$ -керамики.

При изготовлении образцов циркониевой керамики, стабилизированной оксидом кальция, упрочненной оксидом алюминия, с добавлением диоксида кремния ( $\text{Ca-ATZ-SiO}_2$ ) выдерживали следующие соотношения компонентов: 84,6 : 5,88 : 5,52 : 4. Изготовленные образцы в форме параллелепипедов подвергали деформации методом одноосного сжатия при комнатных температурах. Скорость деформации варьировали от 0,1 мкм/с до 10 мкм/с. Результаты испытаний представлены на рис. 1.

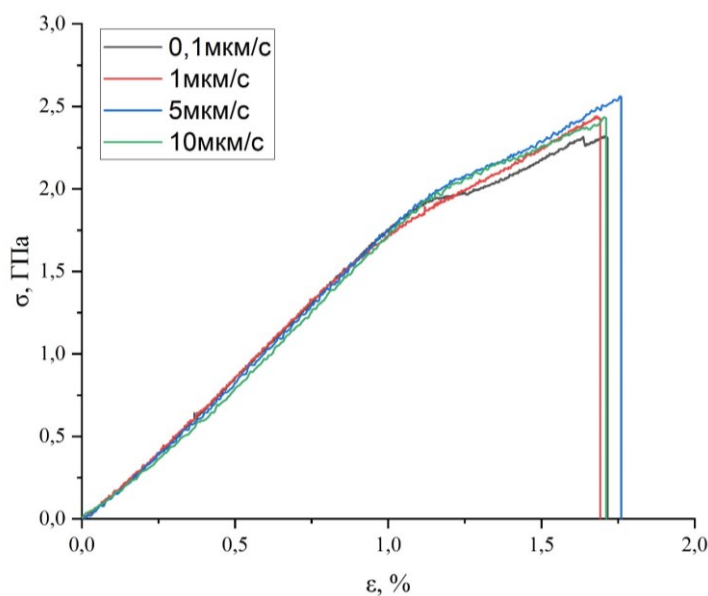


Рис. 1.  $\sigma$ - $\varepsilon$  диаграммы одноосного сжатия  $\text{Ca-ATZ-SiO}_2$  керамики с различными скоростями деформации

Видно, что изменение наклона прямых, вне зависимости от используемых скоростей деформации, наблюдается при значениях  $\sigma \approx 1,85$  ГПа и  $\varepsilon \approx 1,1\%$ . Предел прочности на сжатие и предельная деформация для всех скоростей составляют в среднем  $\sim 2,4$  ГПа и  $\sim 1,7\%$  соответственно (отличаясь в пределах погрешности измерения). Таким образом, показано, что варьирование скорости деформации при одноосном сжатии в интервале от 0,1 мкм/с до 10 мкм/с не вызывает качественных и количественных изменений в наблюдаемом проявлении пластичности кремнийсодержащих ATZ-керамик, т. е. достигнутый запас пластичности ATZ-керамик (обеспеченный введением добавки  $\text{SiO}_2$ ) проявляется в широком интервале (2 порядка величины) скоростей деформации, что обеспечивает повышение ресурса изделий вне зависимости от скоростных режимов деформаций в процессе эксплуатации.

Результаты получены с использованием оснащения Центра коллективного пользования научным оборудованием ТГУ имени Г. Р. Державина. Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта по соглашению № 075-15-2021-709 (уникальный идентификатор проекта RF-2296.61321X0037).

## Литература

1. *Chevalier J.* [et al.] Forty years after the promise of «ceramic steel?»: Zirconia-based composites with a metal-like mechanical behavior // *J. Am. Ceram. Soc.* 2020. V. 103. P. 1482–1513.
2. *Dmitrievskiy A. A., Zhigacheva D. G., Vasyukov V. M., Ovchinnikov P. N.* Low-temperature degradation resistance and plastic deformation of ATZ ceramics stabilized by CaO // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021. V. 2103:012075. DOI: 10.1088/1742-6596/2103/1/012075.
3. *Alao A.-R., Yin L.* Nanoindentation characterization of the elasticity, plasticity and machinability of zirconia // *Materials Science and Engineering A.* 2015. V. 628. P. 181–187. DOI: 10.1016/j.msea.2015.01.051.



# Секция нанооптики и спектроскопии

Председатель: Л. А. Сурин (д. ф.-м. н.)

Зам. председателя: В. В. Медведев (к. ф.-м. н.)

Секретарь: А. В. Летохова

Дата: 06.04.2023

Время: 10:00

УДК 538.94

## Эффект сверхтекучего увлечения между экситон-поляритонами и сверхпроводящим электронным газом

А. Ф. Аминов<sup>1</sup>, А. А. Соколик<sup>1,2</sup>, Ю. Е. Лозовик<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

<sup>2</sup>Институт спектроскопии РАН

Эффект кулоновского увлечения (или дрэга) [1] в двухслойных электронных системах позволяет получать в эксперименте информацию о межслойном и внутрислойном взаимодействиях электронов, беспорядке, временах релаксации, а также об электронных законах дисперсии. Современные теоретические и экспериментальные исследования эффектов увлечения направлены на выявление роли коллективных эффектов, таких как межслойное электрон-дырочное спаривание экситонного типа [2], или на реализацию эффектов на базе других физических платформ, например ультрахолодных атомных газов [3, 4]. Один из вариантов квантово-когерентного коллективного явления — это эффект сверхтекучего увлечения между веществами в сверхтекучих или сверхпроводящих состояниях. Этот эффект изначально был предсказан А. Ф. Андреевым и Е. П. Башкиным для смеси сверхтекучих  $^3\text{He}$  и  $^4\text{He}$  [5], а последующие теоретические исследования обобщили его на случаи ультрахолодных атомных газов, сверхтекучую материю в ядрах нейтронных звезд [6] и сверхпроводники [7].

В представленной работе [8] был изучен эффект сверхтекучего увлечения между сверхпроводящими электронами и бозе-конденсированными прямыми или непрямыми экситонными поляритонами (рис. 1). С помощью диаграммной техники Фейнмана были получены аналитические выражения для плотности сверхтекучего дрэга в рассматриваемых системах, и на их основе были произведены численные расчеты с учетом реалистичных параметров, соответствующих электронному и экситонному слоям на основе полупроводниковых квантовых ям или двумерных дихалькогенидов переходных металлов. Изучалось влияние экранирования межслойного взаимодействия на эффект увлечения, для этого расчеты проводились с учетом экранирования металлического типа в приближениях Томаса–Ферми и хаотических фаз, а также без учета экранирования. Дополнительно были произведены оценки плотности сверхтекучего дрэга между сверхпроводником и бозе-конденсатом экситонов без оптической микрополости.

Было показано, что плотность сверхтекучего дрэга падает с увеличением температуры (рис. 2), за нуляется при приближении к температуре свехпроводящего перехода и падает с увеличением межслойного расстояния как степенная функция. Анализ роли низкочастотных ротонных возбуждений показал,

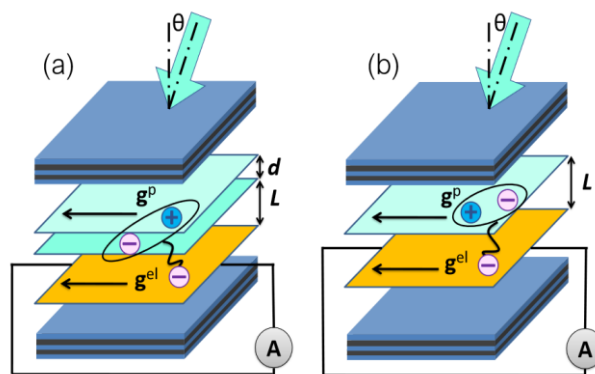


Рис. 1. Схематическое изображение изучаемых систем: с пространственно непрямыми (a) и прямыми (b) экситонами. Лазерное излучение создает поток поляритонов, который вследствие эффекта сверхтекучего увлечения индуцирует сверхтекучий ток в электронной системе. Предлагается измерить его величину в эксперименте

что в окрестности фазового перехода в состоянии суперсолида эффект увлечения существенно усиливается (рис. 3). Результаты расчетов зависят от выбранного типа экранирования: приближение Томаса–Ферми недооценивает плотность дрэга, а плотность дрэга, найденная без учета экранирования, оказывается переоцененной. Показано, что наиболее адекватное описание получается при учете экранирования в приближении хаотических фаз. Наконец, массовая плотность дрэга в электрон-экситонной системе без микрополости получается близкой к таковой в электрон-поляритонной системе, однако из-за малости критической скорости сверхтекучего движения экситонов по сравнению с поляритонной критической скоростью индуцированные токи в системе электрон–экситон обнаружить значительно труднее.

Было показано, что индуцированный вследствие эффекта увлечения сверхтекучий ток может достигать плотности порядка  $10^5$  А/м<sup>2</sup>, что по порядку величины совпадает с критическими токами в обычных сверхпроводниках. Таким образом, при реалистичных условиях эффект оказывается достаточно сильным для надежной регистрации в эксперименте, схема которого показана на рис. 1. В представленной работе предполагалось, что сверхпроводимость в электронном слое обусловлена недавно предложенным поляритонным механизмом [9], но наши оценки показывают, что эффект должен существовать и в случае обычных сверхпроводников.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 21-52-12038) и Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ. Работа по аналитическому выводу выражений для плотности сверхтекучего дрэга была выполнена в рамках проекта Госзадания FFUU-2021-0003.

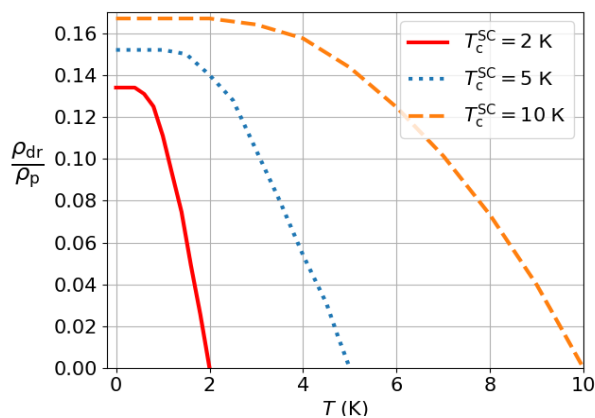


Рис. 2. Зависимость массовой плотности дрэга, нормированной на массовую плотность поляритонного конденсата, от температуры. Рассмотрен случай не-прямых поляритонов в полупроводниковой квантовой яме. Показаны результаты расчета для сверхпроводников с критическими температурами  $T_c=2$ ; 5 и 10 К

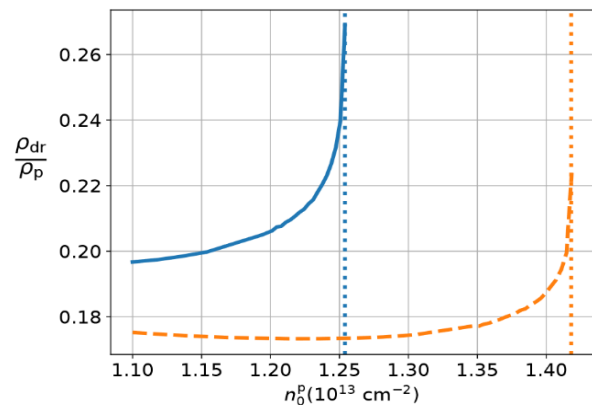


Рис. 3. Зависимость массовой плотности дрэга от плотности конденсата вблизи фазового перехода в состояние суперсолида (вертикальные пунктирные линии). Сплошная и штриховая линии соответствуют непрямым поляритонам на основе, соответственно, полупроводниковых квантовых ям и дихалькогенидов переходных металлов

## Литература

1. *Narozhny B., Levchenko A.* Coulomb drag // *Rev. Mod. Phys.* 2016. V. 88: 025003.
2. *Croxall A. F.* [et al.]. Anomalous Coulomb drag in electron-hole bilayers // *Phys. Rev. Lett.* 2008. V. 101: 246801.
3. *Fil D. V., Shevchenko S. I.* Nondissipative drag of superflow in a two-component Bose gas // *Phys. Rev. A.* 2005. V. 72: 013616.
4. *Demin M. V., Lozovik Y. E., Sharapov V. A.* Bose condensate drag in a system of two coupled traps // *JETP Lett.* 2002. V. 76. P. 135–138.
5. *Andreev A., Bashkin E.* Three-velocity hydrodynamics of superfluid solutions // *Sov. Phys. JETP.* 1975. V. 42. P. 164–167.
6. *Alpar M. A., Langer S. A., Sauls J. A.* Rapid postglitch spin-up of the superfluid core in pulsars // *Astrophys. J.* 1984. V. 282. P. 533–541.
7. *Duan J.-M., Yip S.* Supercurrent drag via the coulomb interaction // *Phys. Rev. Lett.* 1993. V. 70. P. 3647–3650.
8. *Aminov A. F., Sokolik A. A., Lozovik Y. E.* Superfluid drag between excitonic polaritons and superconducting electron gas // *Quantum.* 2022. V. 6: 787.
9. *Coilet O., Zeytinoglu S., Sigrist M., Demler E., Imamoglu A.* Superconductivity and other collective phenomena in a hybrid bose-fermi mixture formed by a polariton condensate and an electron system in two dimensions // *Phys. Rev. B.* 2016. V. 93: 054510.

## Год наблюдений за парниковыми газами спектрометром МЛГС

*И. Ш. Газизов*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В данной работе представлен многоканальный лазерный гетеродинный спектрометрический прибор (МЛГС) для исследования атмосферы Земли в ближнем инфракрасном диапазоне. Поводом для создания подобного прибора является слабое покрытие парниковых газов в атмосфере Земли существующими измерительными сетями. Высокое спектральное разрешение гетеродинной спектроскопии позволяет изучать структуру и динамику атмосферы, при этом оборудование остается компактным и недорогим. МЛГС работает в режиме солнечных наблюдений, когда источником сигнала является излучение Солнца. Прибор способен проводить измерения концентрации метана, воды и углекислого газа в столбе атмосферы, а также производить их вертикальное профилирование и доплеровские измерения ветра. Наземный прототип проводит измерения в течение восьми лет, также запланированы две космические миссии.

Принцип гетеродинной спектроскопии заключается в переносе высокочастотного оптического сигнала в низкочастотный радиодиапазон за счет интерференции лазерного и солнечного излучения на фотодиоде, для последующей обработки сигнала биений с помощью цифровой электроники. Прототип МЛГС регистрирует спектры пропускания атмосферы в окрестностях 1,6 и 1,65 мкм каждые 30 с с отношением сигнал/шум 300. Узкая полоса пропускания прибора позволяет разрешить профиль изолированной вращательной линии колебательной полосы поглощения. Профиль подобной линии содержит информацию о различных слоях атмосферы, поэтому для восстановления информации о составе атмосферы применяется обратное моделирование со 100-слойной моделью атмосферы.

Доклад сосредоточен на обработке данных и сравнении измерений концентраций метана и углекислого газа за 2022 г. со станцией фурье-спектрометра в Санкт-Петербурге. Предварительный анализ показывает хорошее согласие в tandemных измерениях с сертифицированными сетями, что открывает будущее для доступных измерительных сетей.

### Литература

1. Zenevich S. [et al.]. A concept of 2U spaceborne multichannel heterodyne spectroradiometer for greenhouse gases remote sensing // Remote Sens. 2021. V. 13(12): 2235.

УДК 533.951, 535.393, 538.958

## О взаимодействии Е-волн с тонкими слоями из слабо проводящего и прозрачного веществ

*Н. В. Зверев<sup>1</sup>, А. Х. Абдуев<sup>1,2</sup>, А. А. Зотов<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Государственный университет просвещения (МГОПУ)

<sup>2</sup>Российский университет дружбы народов

<sup>3</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

В последнее время в силу бурного развития прозрачной электроники, нацеленной на создание и эксплуатацию различных оптических устройств, большой интерес представляют структуры, состоящие из чередующихся тонких слоев слабо проводящего и прозрачного веществ [1, 2].

Рассмотрим такую плоскую слоистую структуру из  $N$  одинаковых слоев слабо проводника толщиной  $d_1$ , между которыми находятся одинаковые слои толщиной  $d_2$  прозрачного вещества с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_2$ . Считаем, что данная структура расположена между двумя прозрачными средами с диэлектрическими проницаемостями  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_3$ . Пусть на эту структуру со стороны среды с  $\epsilon_1$  падает под углом  $\theta$  монохроматическая Е-волна (вектор  $\mathbf{E}$  волны лежит в плоскости ее падения) с частотой  $\omega$ . Тогда энергетические коэффициенты отражения, прохождения и поглощения волны определяются формулами [3]:

$$R = \left| \frac{m_{21}}{m_{22}} \right|^2, \quad T_r = \left| m_{11} - \frac{m_{12}m_{21}}{m_{22}} \right|^2 \operatorname{Re} \left( \sqrt{\frac{\epsilon_3}{\epsilon_1}} \frac{\cos \theta'}{\cos \theta} \right), \quad A = 1 - R - T_r, \quad (1)$$

где  $m_{jk}$  — элементы матрицы  $2 \times 2$  перехода волны через данную слоистую структуру, а  $\theta'$  — угол преломления волны в среде с  $\varepsilon_3$ . Данные элементы  $m_{jk}$  зависят также от продольной и поперечной диэлектрических проницаемостей  $\varepsilon_1(\omega, k)$  и  $\varepsilon_{tr}(\omega, k)$  плазмы электронов проводимости слабого проводника, где  $k$  — волновое число.

Для исследований были взяты диэлектрические проницаемости квантовой электронной плазмы с постоянной частотой столкновений [4, 5]. Эти проницаемости, в свою очередь, зависят от плазменной частоты  $\omega_p$ , от частоты столкновений электронов проводимости в плазме  $\nu$ , от эффективной массы электронов проводимости  $m_e$  и от тепловой скорости электронов проводимости в плазме  $v_T = \sqrt{2k_B T/m_e}$ , где  $T$  — температура электронов плазмы, а  $k_B$  — постоянная Больцмана. Полученные результаты для этих диэлектрических проницаемостей сравниваются с результатами, найденными для проницаемостей классического электронного газа [6].

В качестве слабого проводника нами взят графит [7]. Используя данные [7], рассчитаны эффективные значения плазменной частоты графита и частоты столкновений электронов в графите:  $\omega_p = 2,54 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ ,  $\nu = 2,273 \cdot 10^{11} \text{ Гц}$ . В качестве вещества прозрачной среды с  $\varepsilon_1$  нами выбран воздух или вакуум с  $\varepsilon_1 = 1$ , а веществом прозрачных слоев с  $\varepsilon_2$  и прозрачной среды с  $\varepsilon_3$  является кварц с  $\varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 2$ .

Численные исследования коэффициентов (1) показали, что в случае толщин слоев графита и кварца  $d_1 \sim d_2 \sim c/\omega_p$  (толщина скин-слоя), где  $c$  — скорость света, при частотах  $E$ -волны  $\omega \sim (0,25-2,5)\omega_p$ , лежащих в инфракрасной области, возникают частотные области отражения и прохождения излучения (рис. 1). Данные области являются следствием многократного отражения излучения от слоев и его прохождения в другие слои [1, 3]. При этом значения коэффициентов (1), полученные для проницаемостей квантовой электронной плазмы, практически совпадают со значениями этих коэффициентов в случае классического электронного газа.

А если толщины слоев графита  $d_1 \ll c/\omega_p$ , но одновременно  $d_1 \gg \nu_T/\omega_p$  (радиус Дебая), то наблюдается резонансное поведение коэффициентов (1) при частотах  $E$ -волны  $\omega$ , немного превосходящих плазменную частоту  $\omega_p$ . Такое поведение обусловлено влиянием продольных плазменных колебаний между поверхностями слоев [6]. Здесь имеет место зависимость частоты резонансных пиков от температуры  $T$ , причем с ростом температуры резонансные частоты возрастают (рис. 2).

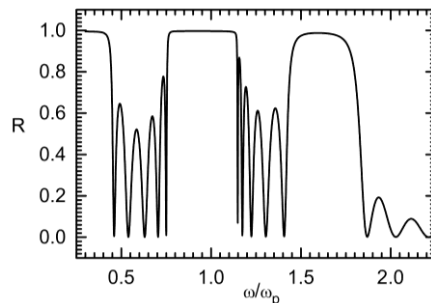


Рис. 1. Зависимость коэффициента отражения  $R$  от частоты  $\omega$ . Величины  $N=6$ ,  $\theta=60^\circ$ ,  $T=294 \text{ К}$ ,  $d_1=1 \text{ мкм}$ ,  $d_2=2 \text{ мкм}$ ,  $\omega_p=2,54 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$

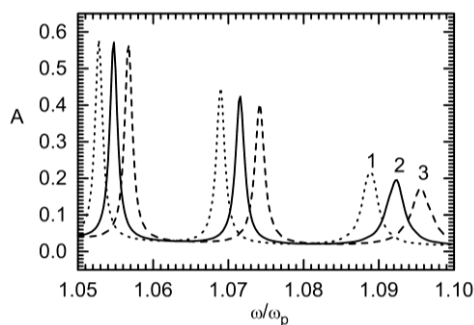


Рис. 2. Зависимость коэффициента поглощения  $A$  от частоты  $\omega$ : 1 —  $T=283 \text{ К}$ , 2 —  $T=294 \text{ К}$ ; 3 —  $T=305 \text{ К}$ . Величины  $N=6$ ,  $\theta=45^\circ$ ,  $d_1=80 \text{ нм}$ ,  $d_2=2 \text{ мкм}$ ,  $\omega_p=2,54 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$

Полученные результаты необходимо учитывать при создании и эксплуатации оптических устройств, состоящих из тонких чередующихся слоев слабо проводящего и прозрачного веществ.

Авторы благодарны проф. А. А. Юшканову и проф. В. В. Беляеву за полезные замечания и предложения. Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 22-19-00157.

### Литература

1. Горелик В. С., Канаев В. В. Усиление электромагнитного поля в ограниченных одномерных фотонных кристаллах // ЖЭТФ. 2016. Т. 150. Вып. 3(9). С. 435–444.
2. Faramarzi Sh., Hervieux P.-A., Bigota J.-Y. Temperature dependence of longitudinal and transverse dielectric functions of inhomogeneous Fermi systems in the local density approximation // J. Optoelectron. Adv. Mater. 2005. V. 7(6). P. 3083–3092.
3. Зверев Н. В., Юшканов А. А. Квантовая электронная плазма в одномерном металло-диэлектрическом фотонном кристалле // Оптика и спектроскопия. 2017. Т. 122. № 2. С. 222–227.
4. Латышев А. В., Юшканов А. А. Поперечная электрическая проводимость квантовой столкновительной плазмы в подходе Мермина // ТМФ. 2013. Т. 175. № 1. С. 132–143.
5. Латышев А. В., Юшканов А. А. Продольная электрическая проводимость в квантовой плазме с переменной частотой столкновений в рамках подхода Мермина // ТМФ. 2014. Т. 178. № 1. С. 147–160.
6. Jones W. E., Kliewer K. L., Fuchs R. Nonlocal theory of the optical properties of thin metallic films // Phys. Rev. 1969. V. 178(3). P. 1201–1203.
7. Бабичев А. П. [и др.]. Физические величины: Справочник / Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. — М.: Энергоатомиздат, 1991.

УДК 539.186

### Комплексные сечения спинового обмена при столкновении щелочных атомов в основном состоянии

*В. А. Картошкин*

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН

В работе рассматриваются столкновения с участием поляризованных щелочных атомов Na и Cs в основном состоянии. Проводится расчет комплексных сечений спинового обмена рассматриваемых атомов в интервале энергий от  $1 \cdot 10^{-4}$  до  $1 \cdot 10^{-2}$  ат. ед. Столкновения атомов щелочных металлов в основном состоянии со спином электрона  $S=1/2$  сопровождаются обменом электронными координатами между сталкивающимися частицами, что приводит к передаче поляризации между ними (т. е. к известному явлению спинового обмена). Кроме того, наряду с передачей поляризации от одного партнера к другому происходит уширение и смещение линий магнитного резонанса сталкивающихся атомов при спин-обменных столкновениях. Последние два процесса зависят, в частности, от комплексного сечения спинового обмена. Спин-обменные столкновения приводят к уширению линий магнитного резонанса и сдвигу частоты линий магнитного резонанса [1], а также к образованию высших поляризационных моментов [2] исследуемых атомов. Оба этих процесса влияют на точностные характеристики приборов квантовой электроники [3]. Кроме того, интерес к изучению столкновений щелочных атомов в основном состоянии обусловлен исследованиями процессов с участием «холодных» атомов щелочных металлов в ловушках различных типов [4]. Следует отметить, что при столкновениях щелочных атомов при не слишком низких температурах, когда время сверхтонкого взаимодействия ( $T=1/\Delta\nu$ ) (например,  $\Delta\nu=9192 \cdot 10^6$  Гц для  $^{133}\text{Cs}$  и  $\Delta\nu=1771 \cdot 10^6$  Гц для  $^{23}\text{Na}$  [5]) значительно больше времени столкновения, которое составляет порядка  $10^{-12}$  с, процесс спинового обмена можно рассматривать только как эволюцию спинов электронов во время столкновения. Другими словами, предполагается, что полный электронный спин сохраняется в процессе столкновения. Между столкновениями происходит взаимодействие электронных и ядерных спинов и перераспределение электронной поляризации с передачей части поляризации ядру. С учетом этого молекула, образовавшаяся из двух щелочных атомов в процессе столкновения, может быть описана в основном состоянии с помощью двух потенциалов, соответствующих суммарным электронным спинам системы  $S_1=0$  и  $S_2=1$ . Как следует из теории рассеяния, расчет соответствующих сечений обусловлен знанием соответствующих фаз рассеяния  $\delta_l$ .

Процесс спинового обмена при столкновении атомов  $A$  и  $B$  можно описать с помощью комплексного сечения спинового обмена вида:

$$q^{AB} = q^{AB} + i q^{AB}. \quad (1)$$

Можно показать [6], что действительная и мнимая части комплексного сечения, выраженные через фазы рассеяния на синглетном ( $S=0$ ) и триплетном ( $S=1$ ) термах, имеют вид

$$q^{-AB} = \frac{\pi}{k_{AB}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \left[ \delta_1^{AB}(l) - \delta_0^{AB}(l) \right],$$

$$q^{=AB} = \frac{\pi}{k_{AB}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \left[ \delta_1^{AB}(l) - \delta_0^{AB}(l) \right].$$
(2)

Здесь  $l$  — орбитальное квантовое число,  $k_{AB}$  — волновое число,  $\delta_s^{AB}(l)$  — фаза рассеяния в канале с полным спином  $S$  (0 или 1).

В работе в квазиклассическом приближении на основании выражений (1) и (2) и потенциалов взаимодействия из работы [7] проводится расчет фаз рассеяния в интервале энергий столкновения от  $10^{-4}$  до  $10^{-2}$  ат. ед. Возможность использования квазиклассического приближения обусловлена тем, что вклад в сечения дает большое число фаз рассеяния, даже при минимальной энергии столкновения. На рис. 1 приведены зависимости действительной и мнимой частей комплексного сечения спинового обмена от энергии столкновения для системы Na–Cs.

Как следует из рис. 1, действительная часть сечения спинового обмена имеет положительный знак во всем интервале исследуемых энергий. В то же время мнимая часть сечения спинового обмена имеет отрицательный знак практически в том же интервале энергий.

Для сравнения полученных сечений с экспериментальными данными необходимо провести максвелловское усреднение по скоростям и перейти от энергетических зависимостей сечений к зависимости сечений от температуры:

$$\sigma(T) = (k_B T)^{-2} \int_0^{\infty} q(E) E \exp(-E/k_B T) dE.$$
(3)

Полученные в работе сечения могут быть использованы при расчете сдвига частоты магнитного резонанса сталкивающихся атомов, обусловленного спин-обменными столкновениями, а также при расчете вероятности передачи поляризации при «непрямой» оптической ориентации атомов в системе Na–Cs.

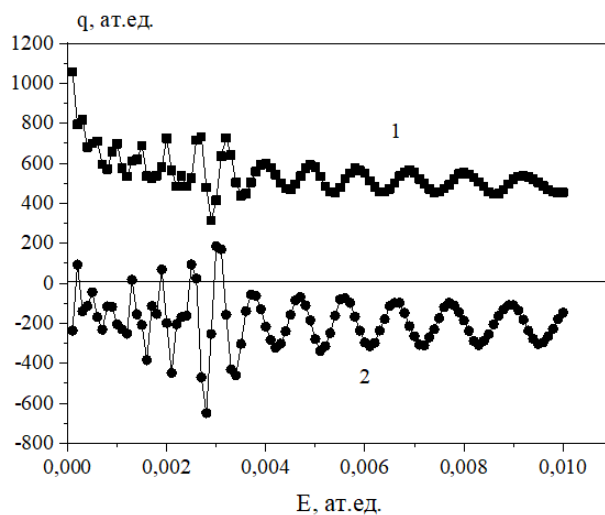


Рис. 1. Зависимость от энергии столкновения ( $E$ ) действительной (1) и мнимой (2) частей комплексного сечения спинового обмена

### Литература

1. Дмитриев С. П., Доватор Н. А., Картошкин В. А. Спиновый обмен при столкновении двух атомов цезия в основном состоянии // ЖТФ. 2015. Т. 85(6). С. 40–43.
2. Дмитриев С. П., Доватор Н. А., Картошкин В. А., Окуневич А. И. Поиск наблюдаемых, отличных от ориентации, при спин-обменных столкновениях щелочных атомов // Оптика и спектроскопия. 1994. Т. 77. С. 712–713.
3. Petrenko M. V., Pazgalev A. S., Vershovskii A. K. Ultimate parameters of the all-optical single-beam nonzero magnetic field sensor for biological applications // IEEE Magn. Lett. 2021. V.12: 8104605.
4. Hawamdeh M. M. [et al.]. Scattering properties of  $^7\text{Li}$  vapor // Eur. Phys. J. Plus. 2022. V. 137: 1025.

5. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике. — М: Атомиздат, 1980.
6. Суннакава С. Квантовая теория рассеяния. — М: Мир, 1979.
7. Dosenko O. [et al.]. The coupling of the  $X^1\Sigma^+$  and  $a^3\Sigma^+$  states of the atom pair  $\text{Na}^+\text{Cs}$  and modelling cold collisions// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2006. V. 39(19):s929.

УДК 535.342

## Синтез, структура, оптические и магнитные свойства кристаллов $\text{LnCr}_3(\text{BO}_3)_4$ ( $\text{Ln} = \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Dy}, \text{Ho}$ )

**Н. Н. Кузьмин<sup>1,2,3</sup>, К. Н. Болдырев<sup>1,3</sup>, В. В. Мальцев<sup>2</sup>, Е. П. Микляева<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>Институт спектроскопии РАН

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

<sup>3</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>4</sup>Апрелевское отделение ФГБУ «ВНИГНИ»

Бораты металлов демонстрируют большое структурное разнообразие, что приводит к широкому диапазону термических, магнитных и оптических свойств [1]. За последние десятилетия синтезирован и изучен ряд этих соединений, которые являются перспективными функциональными материалами. Например, кристаллы  $\beta\text{-BaB}_2\text{O}_4$  (BBO),  $\text{LiB}_3\text{O}_5$  (LBO) используются для генерации второй гармоники; борат  $\text{K}_3\text{YB}_6\text{O}_{12}$  является хорошей матрицей для люминофоров;  $\text{Ba}_3\text{InB}_9\text{O}_{18}$  — многообещающий сцинтиллятор;  $\text{Fe}_3\text{BO}_6$  — перспективный твердый электролит.

Значительный интерес среди боратов металлов вызывают двойные бораты, которые содержат в своей структуре ионы редкоземельных элементов (РЗЭ) и  $3d$ -металлов. В этих соединениях могут возникать интересные магнитные свойства, которые появляются благодаря наличию и взаимодействию двух магнитных подсистем. Такие бораты можно разделить на несколько структурных групп: соединения  $\text{LnLn}_3(\text{BO}_3)_4$  ( $\text{Ln} = \text{PЗЭ}, \text{LN} = \text{Sc}, \text{Fe}, \text{Cr}$ ) со структурой минерала хантита, борат  $\text{La}_4\text{VBO}_{10}$ , борат  $\text{Ln}_7\text{VBO}_{17}$  ( $\text{Ln} = \text{PЗЭ}$ ), соединения  $\text{LnLn}(\text{BO}_3)_2$  ( $\text{Ln} = \text{PЗЭ}, \text{LN} = \text{Sc}, \text{Cr}$ ) со структурой минерала доломита, метабораты  $\text{LnLn}(\text{BO}_2)_5$  ( $\text{Ln} = \text{PЗЭ}, \text{LN} = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$ ), соединения  $\text{LNLn}_2(\text{B}_2\text{O}_5)_2$  ( $\text{Ln} = \text{PЗЭ}, \text{LN} = \text{Ni}, \text{Cu}$ ) со структурой минерала гадолинита, бораты  $\text{CuLn}_2(\text{B}_8\text{O}_{16})$  ( $\text{Ln} = \text{PЗЭ}$ ).

Бораты  $\text{LnCr}_3(\text{BO}_3)_4$  относятся к обширному семейству хантитоподобных боратов. Эти соединения достаточно слабо изучены. Имеются немногочисленные работы по синтезу этих соединений [2, 3]. В работе [2] также показано, что для них характерны две структурные модификации: ромбоэдрическая (пр. гр.  $R32$ ) и моноклинная (пр. гр.  $C2/c$ ), которые во многих случаях сосуществуют в кристаллах. Их соотношение зависит от редкоземельного иона, концентрации исходных компонентов в расплаве и условий роста кристаллов. Двойные бораты  $\text{LnCr}_3(\text{BO}_3)_4$  с  $\text{Ln} = \text{La}, \text{Nd}, \text{Sm}–\text{Dy}$  упорядочиваются антиферромагнитно с температурой Нееля  $T_N$  в диапазоне 6,5–10 К [4, 5].

В настоящей работе проведено исследование тройных оксидных систем  $\text{Ln}_2\text{O}_3–\text{Cr}_2\text{O}_3–\text{B}_2\text{O}_3$  ( $\text{Ln} = \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Dy}, \text{Ho}$ ). Обнаружено, что в них формируются такие фазы, как  $\text{LnBO}_3$ ,  $\text{Ln}_3\text{BO}_6$ ,  $\text{LnCrO}_3$ ,  $\text{CrBO}_3$ ,  $\text{LnCr}(\text{BO}_3)_2$ ,  $\text{LnCr}_3(\text{BO}_3)_4$ . Синтез кристаллов  $\text{LnCr}_3(\text{BO}_3)_4$  для изучения их свойств проводился в псевдодвойных ( $\text{LnCr}_3(\text{BO}_3)_4–\text{K}_2\text{Mo}_3\text{O}_{10}$ ) и в псевдотройных ( $\text{LnCr}_3(\text{BO}_3)_4–\text{K}_2\text{Mo}_3\text{O}_{10}–\text{B}_2\text{O}_3$ ) системах. В них были определены зоны кристаллизации  $\text{LnCr}_3(\text{BO}_3)_4$ ,  $\text{CrBO}_3$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  и их сокристаллизации. Изучение термических свойств боратов  $\text{LnCr}_3(\text{BO}_3)_4$  показало, что они плавятся инконгруэнтно при температуре около 1350°C. Исследование спектров поглощения кристаллов  $\text{LnCr}_3(\text{BO}_3)_4$  в дальнем инфракрасном диапазоне показало, что с увеличением доли тримолибдата калия и оксида бора в исходной шихте увеличивается доля ромбоэдрической модификации в получаемых кристаллах. На основании этого получилось очертить область ее преимущественной кристаллизации. В этой области были получены кристаллы для определения схем энергетических уровней ионов  $\text{Sm}^{3+}$ ,  $\text{Dy}^{3+}$ ,  $\text{Ho}^{3+}$  в парамагнитном состоянии  $\text{LnCr}_3(\text{BO}_3)_4$  и температуры антиферромагнитного упорядочения этих соединений.

Работа выполнена в рамках проекта Госзадания FFUU-2022-0003. Н. Н. Кузьмин и К. Н. Болдырев входят в состав ведущей научной школы РФ «Оптико-спектральная наноскопия квантовых объектов и диагностика перспективных материалов» (проект НШ-776.2022.1.2).

### Литература

1. Becker P. Borate materials in nonlinear optics// Adv. Mater. 1998. V. 10. P. 979–992.

2. *Borovikova E. Y.* Physical Review Vibrational spectra and factor group analysis of rare-earth chromium borates,  $\text{RCr}_3(\text{BO}_3)_4$ , with  $\text{R} = \text{La} - \text{Ho}$  // *Vib. Spectrosc.* 2013. V. 68. P. 82–90.
3. *Кузьмин Н. Н.* [и др.]. Синтез, спектроскопические и магнитные свойства кристаллов  $\text{TbCr}_3(\text{BO}_3)_4$  // Неорганические материалы. 2020. Т. 56. С. 873–881.
4. *Popova E. A.* [et al.] Thermodynamic and optical properties of  $\text{NdCr}_3(\text{BO}_3)_4$  // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 76(5): 054446.
5. *Boldyrev K. N.* Physical Review Thermal and magnetic properties and optical spectroscopy of  $\text{SmCr}_3(\text{BO}_3)_4$  // *Phys. Rev. Mater.* 2021. V. 5(10): 104413.

УДК 533.922

## Нестационарная модель теплоемкости газовой атмосферы вблизи плазменного источника излучения

*Т. Линкова*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

На сегодняшний момент технология литографии занимает важное место в производстве интегральных микросхем. Минимальный размер элементов на микросхеме ограничен дифракционным пределом. Возможным способом его уменьшения является уменьшение длины волны источника излучения. В качестве подходящего варианта для производства были выбраны плазменные источники излучения экстремального ультрафиолета (ЭУФ) с длиной волны 13,5 нм [1]. В рассматриваемой задаче плазма в источнике образуется из поступающих в систему капель олова после воздействия на них двух последовательных лазерных импульсов. Излучение, распространяющееся от плазмы, собирается интерференционным коллекторным зеркалом в промежуточном фокусе. Ионы и другие частицы, сосредоточенные в излучающей области, со временем разлетаются, попадая на интерференционное зеркало. Процесс загрязнения поверхности зеркала делает невозможным работу источника. Одним из вариантов решения этой проблемы является использование газовой защиты. Она реализуется за счет торможения ионов олова в газовой среде. Среда подбирается, исходя из свойств прозрачности газа для экстремального ультрафиолета. Наибольшей прозрачностью в области 13,5 нм обладает водород, поэтому он используется в промышленных источниках излучения в качестве газовой защиты. В связи с этим значительный интерес представляет изучение свойств водородной атмосферы в условиях соседства с неравновесной плазмой олова.

В данной работе исследовано поведение теплоемкости водорода при высоких температурах. Изучено влияние на теплоемкость таких процессов, как активация колебательных степеней свободы в молекулах водорода и диссоциация молекул при высоких температурах [2, 3]. По результатам рассмотрения стационарной задачи было определено, что для совпадения теоретической модели с экспериментом необходимо учитывать нелинейность колебательных уровней молекулы водорода. Также было установлено, что для лучшего согласования с экспериментальными данными следует учитывать не менее трех колебательных уровней.

По результатам решения нестационарной задачи было получено время установления равновесия в системе. Для реакций колебательного возбуждения и релаксации концентрации компонентов атмосферы достигают стационарных значений за время порядка 10 мс. Для случая, учитывающего дополнительно процессы диссоциации и рекомбинации, концентрация молекулярного водорода достигает стационарных значений за такое же время. Но полное равновесие системы и выход на стационар концентрации атомарного водорода наступает только на временах порядка сотен секунд. Время перераспределения энергии в системе получилось сравнимым со временем прохождения потока газа по установке, что делает рассматриваемую задачу неравновесной. Таким образом, активация молекулярных колебаний и диссоциация оказывают значительное влияние на равновесие системы и должны быть учтены при определении теплоемкости.

### Литература

1. *Абраменко Д. Б.* [и др.]. Плазменные источники экстремального ультрафиолетового излучения для литографии и сопутствующих технологических процессов (к 50-летию Института спектроскопии РАН) // *УФН.* 2019. V. 189(3). P. 323–334.
2. *Cohen N., Westberg K. R.* Chemical kinetic data sheets for high-temperature chemical reactions // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 1983. V. 12. P. 531–590.
3. *Lepp S., Shull J. M.* The kinetic theory of  $\text{H}_2$  dissociation // *Astrophys. J.* 1983. V. 270. P. 578–582.



## Расчеты полевого и массового сдвигов для извлечения среднеквадратичных зарядовых радиусов изотопов таллия

*Г. О. Пенязьков<sup>1,2</sup>, С. Д. Просняк<sup>1,2</sup>, А. Е. Барзах<sup>1</sup>, Л. В. Скрипников<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Петербургский институт ядерной физики НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет

Среднеквадратический зарядовый радиус ядра является одним из самых важных его свойств, а также необходимыми данными для изучения других свойств ядер. Получение информации о величинах среднеквадратических зарядовых радиусов возможно при экспериментальном и теоретическом изучении изотопических сдвигов. На данный момент накоплено большое количество экспериментальных данных по величинам изотопических сдвигов в различных атомах. В частности, подобные эксперименты для различных электронных состояний проводились на установке ИРИС в НИЦ КИ-ПИЯФ для атома таллия [1]. Однако для реинтерпретации экспериментальных данных в терминах среднеквадратических зарядовых радиусов необходимо знать величины электронных факторов. В случае атома таллия проведенные ранее расчеты электронных факторов имеют неконтролируемую погрешность.

Изотопический сдвиг состоит из двух вкладов: полевого (связанного с изменением среднеквадратического зарядового радиуса ядра) и массового (связанного с эффектом отдачи ядра). Массовый вклад, в свою очередь, делится на нормальный и специфический. Для атома Tl полевой фактор был рассчитан ранее [2]. Тем не менее величины полевого фактора, рассчитанные в рамках различных теорий, имеют отличие порядка 30%. Кроме того, массовый фактор практически не был рассчитан вовсе.

В данном исследовании (DOI: 10.1063/5.0142202) мы уточняем значение константы полевого сдвига, а также вычисляем константы нормального и специфического массовых сдвигов для электронных переходов 535 нм, 277 нм и 378 нм в нейтральном таллии на высоком уровне учета эффектов электронной корреляции методом связанных кластеров. Насколько нам известно, расчеты полевого и массового факторов в тяжелых атомах с учетом четырехкратных кластерных амплитуд ранее не проводились. Кроме того, в этой работе нами разрабатывается подход для систематической оценки теоретической погрешности электронных факторов. Наконец, используя полученные результаты, мы интерпретируем экспериментальные данные [1] в терминах среднеквадратичных зарядовых радиусов на новом уровне точности.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 19-72-10019) и гранта фонда развития теоретической физики и математики «Базис» (проект № 21-1-2-47-1).

### Литература

1. *Barzakh A. E., Batist L. Kh., Fedorov D. V., Ivanov V. S., Mezilev K. A., Molkanov P. L., Moroz F. V., Orlov S. Yu., Panteleev V. N., Volkov Yu. M.* Multiple band structures in <sup>169,170</sup>Re: Search for the wobbling mode in <sup>169</sup>Re, and residual-interaction analysis of structures in <sup>170</sup>Re // *Phys. Rev. C*. 2013. V. 87: 024315.
2. *Mårtensson-Pendrill A.-M.* Magnetic Moment Distributions in Tl Nuclei // *Phys. Rev. Lett.* 1995. V. 74. P. 2184–2187.

## Оптическая диагностика одиночных наночастиц, перспективных для применений в биомедицине

*Г. О. Силаев<sup>1,2</sup>, Ф. В. Верещагин<sup>1</sup>, А. Т. Шайдулин<sup>2,3</sup>, Е. О. Орловская<sup>3</sup>, Ю. В. Орловский<sup>3</sup>,  
Ю. Г. Вайнер<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Институт спектроскопии РАН

<sup>2</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

<sup>3</sup>Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН

Разработка методов оперативной диагностики индивидуальных характеристик наночастиц разной природы является одним из актуальных направлений современной нанооптики. Используемые в настоящее время для этих целей методы электронной и атомно-силовой микроскопии, а также ближнепольная оптическая микроскопия характеризуются сложной и длительной процедурой подготовки образца и самих измерений и, кроме того, весьма дороги. Принципиальным недостатком электронной микроскопии

является то, что этот метод малопригоден для исследований объектов биологической природы, особенно в водных средах. Существенным ограничением электронной микроскопии, особенно при исследованиях биологических объектов, является также то, что электронный луч оказывает нежелательное воздействие на исследуемый образец.

Методы оптической микроскопии не обладают перечисленными недостатками и характеризуются существенно более простой и быстрой процедурой измерений и в подавляющем числе случаев пренебрежимым воздействием на образец. Основными недостатками оптических методов являются более низкое пространственное разрешение и низкая чувствительность, что сильно ограничивает возможность их использования для диагностики индивидуальных параметров наночастиц.

В докладе сообщается о разработке высокочувствительного лазерного ультрамикроскопа, работающего по схеме «светового листа», который позволяет визуализировать в водных растворах одиночные наночастицы размерами до 20 и менее нанометров и определять их индивидуальные размеры по сигналам упругого рассеяния света путем анализа индивидуальных траекторий броуновского их движения.

Приводятся результаты исследований одиночных диэлектрических нанокристаллов фторида лантана —  $\text{LaF}_3$ , допированных ионами европия ( $\text{Eu}^{3+}$ ) и неодима ( $\text{Nd}^{3+}$ ), размерами в пределах 10–30 нм, и их конгломератов, в водном коллоидном растворе с применением разработанного ультрамикроскопа и развитых методик [1, 2]. Сообщается также о результатах сравнительных измерений распределений по размерам этих же наночастиц с помощью разработанного и электронного микроскопов, а также измерений распределений их размеров с применением метода динамического рассеяния света (ДРС).

Исследования были поддержаны в рамках проекта РФФ № 22-22-00998.

### Литература

1. Rocha U. [et al.]. Subtissue imaging and thermal monitoring of gold nanorods through joined encapsulation with Nd-doped infrared-emitting nanoparticles // *Small*. 2016. V. 12(39). P. 5394–5400. DOI: 10.1002/smll.201600866.
2. Timofeeva E. [et al.]. The influence of medium on fluorescence quenching of colloidal solutions of the  $\text{Nd}^{3+}$ :  $\text{LaF}_3$  nanoparticles prepared with HTMW treatment // *Nanomaterials*. 2022. V. 12: 3749. DOI: 10.3390/nano12213749.

УДК 535

## Исследование проникновения оловянных микрокапель сквозь мембраны из одностенных углеродных нанотрубок

*Л. В. Степанов<sup>1,2</sup>, В. В. Медведев<sup>2</sup>, М. С. Кривокорытов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики

<sup>2</sup>Институт спектроскопии академии наук

Фотолитография является одним из ключевых этапов в процессе производства полупроводниковых структур, т. е. компьютерных чипов, в наномасштабе. Поскольку размер производимых структур прямо пропорционален рабочей длине волны, технология EUV литографии с длиной волны 13,5 нм является наиболее перспективной на данный момент технологией.

В качестве источника излучения в EUV литографии используется лазерная плазма олова [1]. Так как источник работает в разреженной атмосфере водорода ( $1 \div 10$  Па), в процессе его работы возникают побочные продукты — оловянные микрокапли, образовавшиеся в результате неполного сгорания олова, плазма, индуцированная EUV излучением из водорода, и т. д. Одной из важных задач при проектировании литографа становится защита его оптики от этих продуктов, что напрямую влияет на эффективность его работы. Благодаря сочетанию высокой прозрачности в диапазоне 13,5 нм [2] и высокой прочности, мембраны из одностенных углеродных нанотрубок (SWCNT) активно используются в качестве системы защиты оптики в литографах. Они позволяют задерживать плазму [3] и регулировать потоки газа [4].

В данной работе рассматривается проникновение оловянных микрокапель сквозь SWCNT мембраны. В процессе работы собран источник микрокапель, позволяющий генерировать потоки оловянных микрокапель диаметром от 50 до 800 нм, со скоростями от 50 до 350 м/с. Экспериментально определена вероятность проникновения капель сквозь мембраны различной толщины в зависимости от их скорости.

## Литература

1. *Fomenkov I. V., Brandt D. C.* [et al.]. Laser produced plasma EUV light source for EUVL patterning at 20 nm node and beyond // *Proceedings*. 2013. V. 8679: 86792I. Extreme Ultrav. (EUV) Lithogr. IV. DOI: 10.1117/12.2012695.
2. *Gubarev V. M.* [et al.]. Single-walled carbon nanotube membranes for optical applications in the extreme ultraviolet range // *Carbon*. 2019. V. 155 P. 734–739.
3. *Gubarev V. M., Krivokorytov M. S.* [et al.]. InSn plasma penetration through protective single-walled carbon nanotube — based membranes // *Appl. Phys. Lett.* 2022. V. 121: 141901.
4. *Gubarev V. M., Krivokorytov M. S., Krivtsun V. M.* [et al.]. Ar permeability through densified single-walled carbon nanotube-based membranes // *J. Appl. Phys.* 2023. V. 133: 095106.

---

# Секция космических исследований и современной астрофизики

---

Председатель: А. М. Садовский (к.ф.-м.н., доцент)

Зам. председателя: В. С. Бескин (д. ф.-м. н., профессор)

Секретарь: А. Ю. Малыхин

---

Дата: 03.04.2023

Время: 10:00

УДК 524.354.4

## О природе трехгорбых профилей пульсаров

*В. С. Бескин<sup>1,2</sup>, А. Ю. Истомин<sup>1</sup>, Ф. А. Князев<sup>1</sup>, А. Г. Михайленко<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Идея о том, что трехгорбые профили радиоизлучения пульсаров могут быть связаны только с О-модой за счет ее преломления в сторону магнитной оси, была высказано впервые в работе Петровой и Любарского [1] уже более 20 лет назад. Однако в то время профиль плотности истекающей плазмы не был известен с достаточной точностью. В нашей работе мы воспользовались недавними результатами работы Бескина и Литвинова [2], в которой профиль плотности вторичной плазмы в рамках модели полого конуса был последовательно определен с учетом спектра изгибного излучения первичных частиц. При этом зависимость концентрации частиц от расстояния до магнитной оси удобно записать в виде

$$n = \frac{\lambda g(r_{\perp})}{2\pi e c} (\Omega B),$$

где  $\lambda g(r_{\perp})$  численно рассчитывался для каждого пульсара индивидуально. Пример такого распределения для пульсара PSR B2111+46 приведен на рис. 1. Целью настоящей работы является анализ этого эффекта для истекающей плазмы.

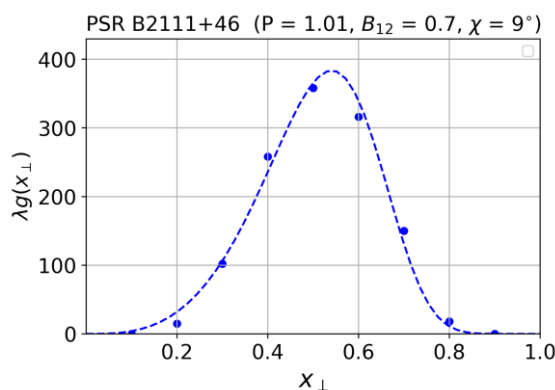


Рис. 1. Профиль плотности для пульсара PSR B2111+46

В данной работе нами было проведено детальное исследование распространения обыкновенной волны (О-моды) в магнитосфере радиопульсаров. Новым элементом здесь стало использование последовательной теории генерации вторичных частиц, позволившей определить плотность истекающей плазмы. В результате было подтверждено преломление О-моды по направлению к магнитной оси, приводящее к формированию центрального пика трехгорбых средних профилей радиопульсаров.

Интенсивность излучения в точке картинной плоскости определялась обратным интегрированием по траектории луча [3]. Для определения траектории луча численно решается стандартная система дифференциальных уравнений в приближении геометрической оптики:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = c \frac{\partial}{\partial k} \left( \frac{k}{n} \right),$$

$$\frac{dk}{dt} = -\frac{\partial \omega}{\partial r} = -c \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{k}{n} \right),$$

в которой для О-моды выражение для коэффициента преломления выглядит следующим образом:

$$n = 1 + \left( \frac{\theta^2}{4} \right) - \sqrt{\frac{\theta^4}{16} + \theta_*^4},$$

$$\theta_*^4 = \frac{\omega_p^2}{\omega^2 \gamma^3},$$

где  $\omega_p$  — плазменная частота,  $\gamma$  — характерный лоренц-фактор истекающей плазмы, а  $\omega$  — частота излучения.

На рис. 2 представлен средний профиль излучения пульсара, полученный в результате численного моделирования для распределения  $\lambda g(r_\perp)$  представленного на рис. 1. Легко увидеть, что полученный профиль имеет ярко выраженный средний горб.

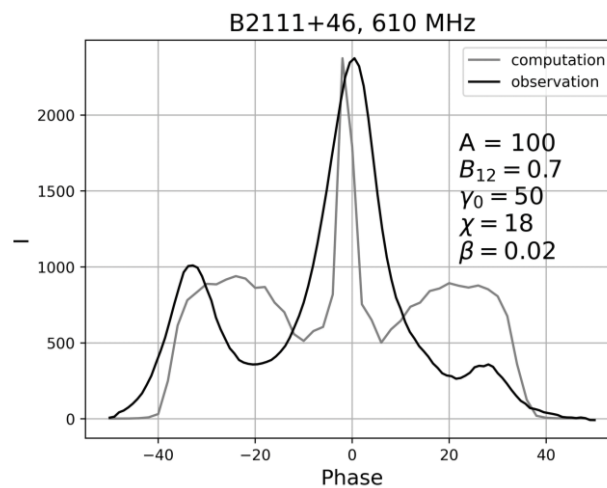


Рис. 2. Средний профиль излучения пульсара полученный в результате численного моделирования

Таким образом, мы показали, что тройные средние показатели радиопульсаров могут быть легко объяснены особенностью преломления обычной О-моды в магнитосфере пульсара. Существенным достижением здесь было то, что мы использовали гораздо более реалистичные профили плотности частиц и энергии, чем это делалось до сих пор. Конечно, вышеуказанные результаты следует рассматривать как первый шаг. Прежде всего, ниоткуда не следует, что профиль радиоизлучения повторяет плотность излучающей плазмы. Далее была использована простейшая модель вращающегося диполя, которая, очевидно, неприменима для миллисекундных пульсаров. Наконец, следует отметить, что здесь мы не учитывали циклотронное поглощение, которое может существенно исказить средний показатель. Мы намерены учесть все эти обстоятельства в следующей работе.

### Литература

1. Petrova S. A., Lyubarskii Y. E. Propagation effects in pulsar magnetospheres // Astron. Astrophys. V. 355. 2000. P. 1168–1180.
2. Beskin V. S., Litvinov P. E. Pulsar death line revisited – I. Almost vacuum gap // MNRAS. V. 510. 2022. P. 2572–2582.
3. Акоюн А. Л., Бескин В. С. К определению формы изображения радиоимпульсов пульсаров в картинной плоскости // Астрономический журнал. 2014. Т. 91. С. 1000–1007.

## Природа изменений геометрии джетов активных галактик

*И. М. Костричкин<sup>1</sup>, А. В. Плавин<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Астрокосмический центр физического института им. П. Н. Лебедева РАН

В этой работе рассматривается эволюция геометрии джета активных ядер галактик (АЯГ) на парсековых масштабах, наблюдаемых в радиодиапазоне. Видимое направление джета у некоторых квазаров меняется со временем [1]. Нами был разработан алгоритм для определения значения угла, соответствующего видимому направлению джета на изображении, что позволяет изучить эволюцию угла во времени и делает возможным массовый анализ.

С помощью этого алгоритма было проанализировано более чем 1000 квазаров, которые наблюдались с 1995 по 2022 гг. в частотном диапазоне от 1,4 до 43 ГГц (рис. 1). На полученные наблюдательные данные были наложены предсказания различных моделей поведения джета, и на основе полученных результатов подтверждена переменность направления джета у отдельных объектов. На основании этого анализа были оценены характерные периоды изменения направления видимого джета для десятка наиболее наблюдаемых объектов. Вместе с этим в работе рассмотрена применимость различных известных моделей, таких как модель спирального джета [2] или модель двойной системы [3], к описанию видимых изменений в геометрии джета не только отдельных активных ядер, но и переменных объектов такого типа в частности.

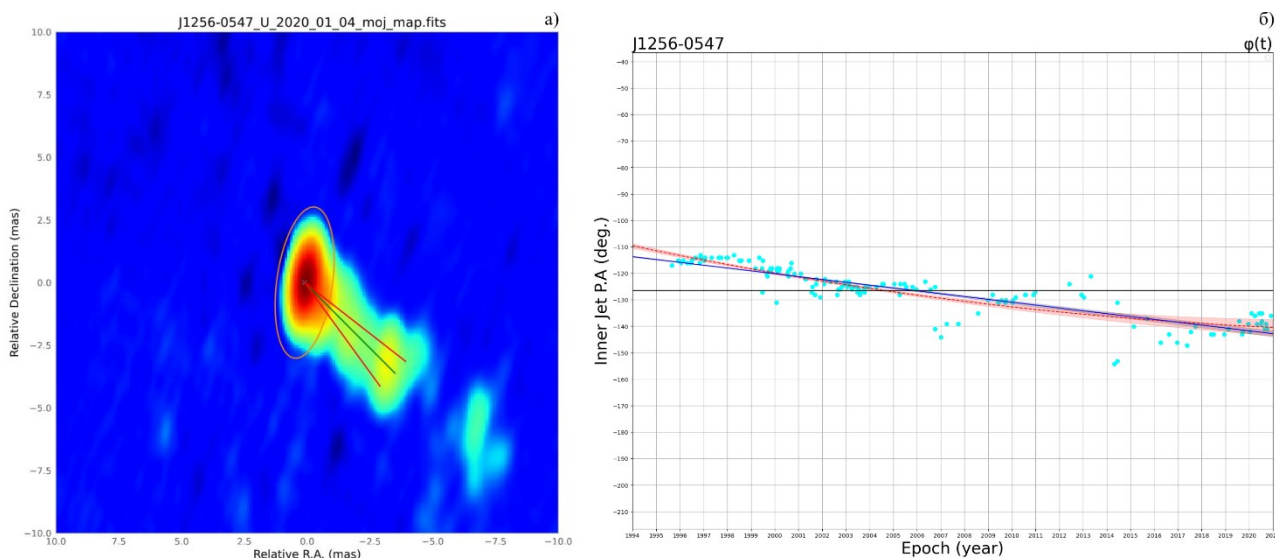


Рис. 1. Карта объекта J1256-0547 (3C 279), полученная 4 января 2020 г. на частоте 15 ГГц. Зеленая линия соответствует найденному направлению джета (а); график зависимости направления джета объекта J1256-0547 от времени, для частоты 15 ГГц (б)

### Литература

1. *Lister M. L.* [et al.]. Mojave. X. Parsec-scale jet orientation variations and superluminal motion in active galactic nuclei // *Astron. J.* 2013. V. 146(5): 120.
2. *Valtonen M. J., Wiik K.* Optical polarization angle and VLBI jet direction in the binary black hole model of OJ287 // *MNRAS.* 2012. V. 421(3). P. 1861–1867.
3. *Butuzova M. S., Pushkarev A. B.* Is OJ 287 a single supermassive black hole? // *Universe.* 2009. V. 6(11): 191.

## Слияние двойных кластеров первичных черных дыр

Ю. Н. Ерошенко<sup>1</sup>, В. Д. Стасенко<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт ядерных исследований РАН

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

Исследуется орбитальная эволюция двойной системы, состоящей из двух кластеров первичных черных дыр. Возможность существования таких кластеров предсказывается в теоретических моделях [1, 2]. Скопление состоит из наиболее массивной центральной черной дыры, окруженной множеством первичных черных дыр с меньшими массами (см. рис. 1).

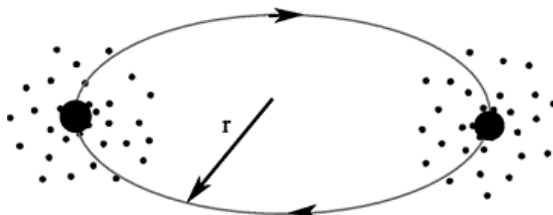


Рис. 1. Схематическое изображение двойного кластера ПЧД

Ранее была разработана модель генерации гравитационно-волновых всплесков при слиянии пар, состоящих из одиночных первичных черных дыр [3]. Это может служить объяснением части событий, зарегистрированных интерферометрами LIGO/Virgo. Подобно одиночным первичным черным дырам, скопления могут образовывать гравитационно связанные пары и сливаться во время своей орбитальной эволюции. Замена одиночных черных дыр скоплениями существенно изменяет весь процесс слияния и конечный темп гравитационных всплесков.

Новым важным фактором является приливное гравитационное взаимодействие скоплений, ведущее к дополнительной диссипации орбитальной энергии, которая переходит во внутреннюю энергию скоплений или уносится черными дырами, вылетающими из скоплений. В данной работе величина приливного взаимодействия рассчитана путем интегрирования возмущений скорости первичных черных дыр вдоль орбиты кластеров и по объему кластеров с учетом адиабатической поправки.

Решается численно следующая система уравнений, включающая потерю энергии и орбитального углового момента на излучение гравитационных волн и на приливную диссипацию:

$$\frac{dA}{dt} = -\frac{\pi}{2^{1/2}} \frac{G^{1/2} M^{1/2} R^2}{A^{5/2}} f_3(e) K - \frac{124}{5} \frac{G^3 M^3}{c^5 A^3} f_1(e),$$

$$\frac{de}{dt} = \frac{1-e^2}{2e} \frac{dA/dt}{A} + \frac{64G^3 M^3}{5c^5 A^4} f_2(e),$$

где  $A$  — большая полуось орбиты двух кластеров,  $e$  — эксцентриситет орбиты,  $G$  — гравитационная постоянная,  $c$  — скорость света,  $M$  — масса кластера,  $R$  — радиус кластера,  $f_1$ ,  $f_2$  и  $f_3$  — вспомогательные функции от  $e$ ,  $K$  — адиабатическая поправка.

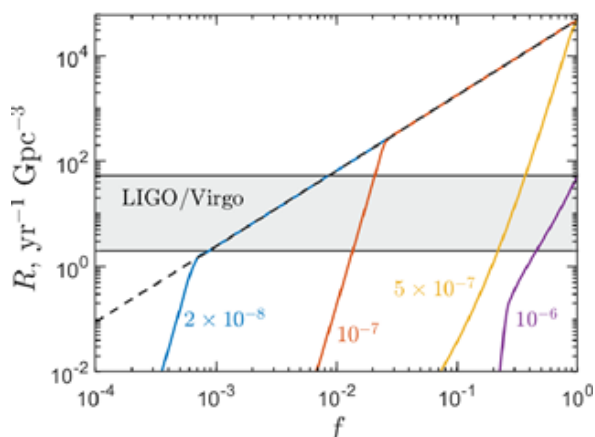


Рис. 2. Рассчитанный темп всплесков гравитационных волн от столкновений центральных первичных черных дыр в двойных скоплениях в зависимости от их доли в составе темной материи  $f$  и отношения радиуса кластера к среднему начальному расстоянию между кластерами  $\mu$ . Величины  $\mu$  указаны у соответствующих им кривых. Верхние части кривых сходятся к темпу слияния одиночных черных дыр в парах с теми же массами, что и массы кластеров (штриховая линия). Заштрихована область, допустимая с точки зрения наблюдений LIGO/Virgo

Сравнение с данными гравитационно-волновых телескопов, представленное на рис. 2, позволяет ограничить долю первичных черных дыр в составе темной материи в зависимости от массы кластеров и

их компактности. Даже доля первичных черных дыр в составе темной материи порядка 1 оказывается совместимой с данными наблюдений LIGO/Virgo, если черные дыры находятся в кластерах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00013.

## Литература

1. Рубин С. Г., Сахаров А. С., Хлопов М. Ю. Образование первичных ядер галактик при фазовых переходах в ранней Вселенной // ЖЭТФ. 2001. Т. 119. С. 1067–1076.
2. Khlopov M. Yu., Rubin S. G., Sakharov A. S. Strong primordial inhomogeneities and galaxy formation // Gravitation Cosmol. 2002. V. 8. P. 57–65.
3. Nakamura T. [et al.]. Gravitational waves from coalescing black hole MACHO binaries // Astrophys. J. 1997. V. 487(2). P. L139–L142.

УДК 524.7-8 52-17 524.7-77

## Моделирование поляризационной структуры релятивистских выбросов квазаров

*Р. В. Тодоров<sup>1</sup>, Е. В. Кравченко<sup>1,2</sup>, И. Н. Пащенко<sup>2,1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

В данной работе представлены результаты компьютерного моделирования переноса поляризованного излучения от протяженных релятивистских струй активных ядер галактик (АЯГ) в радиодиапазоне. Мы приводим результаты сравнения поперечной структуры линейной поляризации, наблюдаемой на наземных радиоинтерферометрах со сверхдлинной базой (РСДБ), с результатами моделирования в рамках разработанной модели.

Согласно современным представлениям, магнитное поле играет ключевую роль как при формировании, так и при распространении и коллимации струй АЯГ на парсековых масштабах [1]. В силу того, что излучение таких струй в радиодиапазоне обусловлено синхротронным механизмом, а следовательно, поляризовано, поляриметрические наблюдения становятся основным источником информации о структуре магнитного поля объектов. Существенную роль в этом играет и фарадеевское вращение, учет которого позволяет сделать выводы о свойствах, распределении и плотности вещества в окрестности релятивистской струи, а также о свойствах излучающей и тепловой плазмы. Сравнивая различные модели с реальными астрономическими наблюдениями, можно делать выводы о структуре источника и свойствах магнитных полей в нем.

В нашей работе на основе предполагаемых профилей распределения магнитных полей, концентрации и скоростей излучающих частиц создается трехмерная модель струи, сквозь которую вдоль лучей зрения решаются уравнения лучистого переноса. На выходе мы получаем карты параметров Стокса ( $I$ ,  $Q$  и  $U$ ), т. е. полного и линейно поляризованного излучения, что в дальнейшем используется для построения синтетических РСДБ-карт, в которых учитывается как реальное покрытие плоскости пространственных частот, так и ограниченная чувствительность.

Недавно были представлены мультиэпоховые стаковые (усредненные) карты поляризации, полученные с использованием многоэпоховых данных РСДБ-наблюдений на 15 ГГц [2]. В то время как большинство профилей достаточно точно объясняются простыми моделями струй со спиральным магнитным полем, ряд источников имеет следующую поляризационную структуру: уярчение поляризационного потока и поперечное направление поляризации на краях и слабая продольная поляризация в центре струи (рис. 1). Для таких источников также характерна высокая переменность направления поляризации в центре струи (рис. 2) [3]. Это, например, источники 0336-019, 0735+178, 1641+399, 1920-211 и 2251+158.

Для объяснения такой структуры мы предлагаем следующую модель. Предполагается струя со спиральным магнитным полем, типичной поляризационной конфигурацией которой является трехпиковая структура — сильный поток и продольная поляризация в центре и слабая поперечная поляризация на краях струи. Предположим, что направление струи меняется во времени. Так как струи АЯГ наблюдаются под малыми углами к лучу зрения, в результате проекционных эффектов даже незначительные реальные вариации направления струи приведут к заметным изменениям ее позиционного угла на небе. Если проварьировать направление струи в проекции на небо с амплитудой порядка  $30^\circ$  и затем усреднить все получившиеся изображения, то из-за наложения поляризации с разной ориентацией излучение в центре струи депо-



ляризуется. Таким образом, рассматриваемая на усредненных картах поляризованная структура, по крайней мере для некоторых источников, может быть объяснена простой моделью спирального поля (рис. 3).

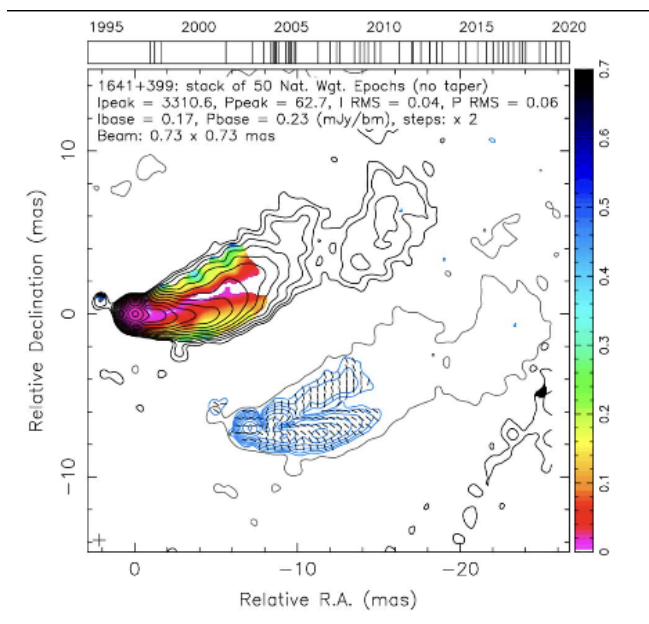


Рис. 1. Стаковая карта поляризации в струе АЯГ 1641+399, 15 ГГц [3]. Контуры показывают уровни интенсивности (сверху — полной, снизу — поляризованного излучения), цвет — степень поляризации, штрихи — ее направление

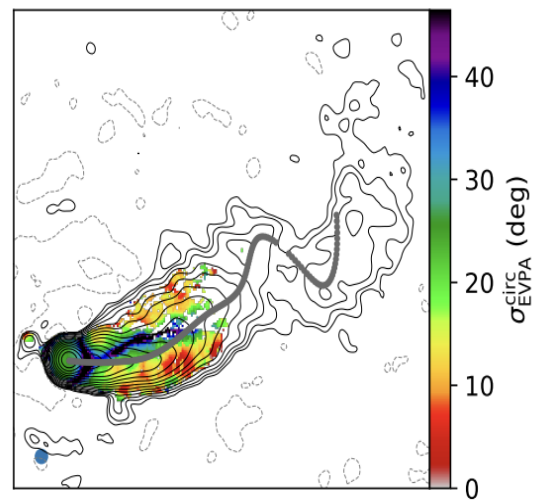


Рис. 2. Цветом показано среднее квадратичное отклонение угла линейной поляризации в струе АЯГ 1641+399 в результате стэкинга изображений [4]

Наблюдательную основу для таких предположений дают исследования [4], в которых зарегистрированы изменения наблюдаемой ориентации струй в диапазоне  $20\text{--}150^\circ$  для большого количества источников, с периодичностью порядка нескольких лет. Такая переменность может быть обусловлена прецессией струи на масштабах  $\sim 10$  лет, что, например, подтверждается последними результатами долгопериодического мониторинга струи в радиогалактике М87 [5] или развитием разного рода неоднородностей [6].

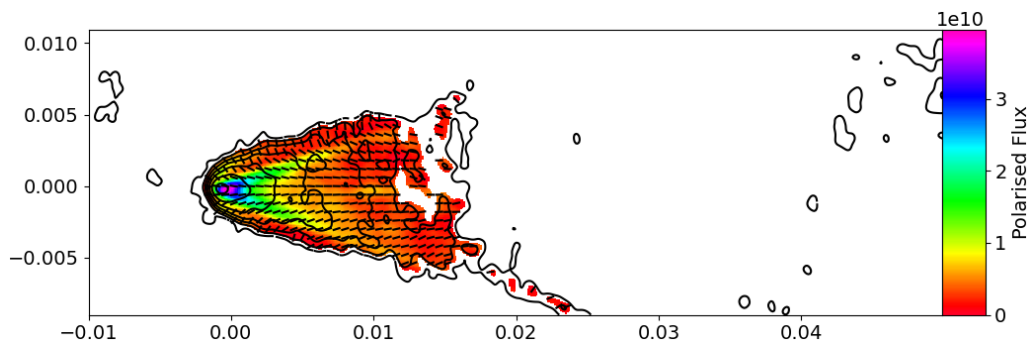


Рис. 3. Синтетическая РСДБ-карта струи АЯГ на частоте 15 ГГц с параметрами: спиральное поле с питч-углом  $89^\circ$ , угол наблюдения струи к лучу зрения около  $4^\circ$ , вариация направления джета с амплитудой  $15^\circ$

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 20-72-10078.

### Литература

1. Zamaninasab M. [et al.] Dynamically important magnetic fields near accreting supermassive black holes//Nature. 2014. V. 510(7503). P. 126–128.
2. Pushkarev A. B. [et al.]. MOJAVE XX. Persistent linear polarization structure in parsec-scale AGN jets//MNRAS 2023. V. 520(4). P. 6053–6069.
3. Zobnina D. I. [et al.]. MOJAVE XXI. Decade-long linear polarization variability in AGN jets at parsec scales//MNRAS. 2023. V. 523(3). P. 3615–3628.
4. Lister M. L. [et al.] Monitoring of jets in active galactic nuclei with VLBA experiments. XVIII. Kinematics and inner jet evolution of bright radio-loud active galaxies//Astrophys. J. 2021. V. 923(1): 30.

5. *Cui Y., Hada K.* [et al.]. Precessing jet nozzle connecting to a spinning black hole in M87 // Preprint. URL.: <https://www.researchsquare.com/article/rs-2624984/v1>. DOI: 10.21203/rs.3.rs-2624984/v1.
6. *Lobanov A. P., Zensus J. A.* A cosmic double helix in the archetypical quasar 3C273 // *Science*. 2011. V. 294(5540). P. 128–131.

УДК 52-17, 520.622, 520.627

## Моделирование сегментированного детектора для регистрации гамма-излучения

*А. А. Мкртчян<sup>1</sup>, А. С. Позаненко<sup>1,2</sup>, П. Ю. Минаев<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт космических исследований РАН

При детектировании в гамма-диапазоне сцинтилляционными детекторами возникает проблема «мертвого» времени. Под этим термином понимают характерное время, в течение которого прибор не способен зарегистрировать вновь поступивший квант излучения. Влияние эффектов мертвого времени существенно в случае, если поток гамма-излучения приближается к обратной величине мертвого времени детектора. Влияние эффектов мертвого времени препятствует измерению истинного потока и энергетического спектра мощных источников гама-излучения. Такие проблемы возникают при регистрации, например, гамма-вспышек земного происхождения [1] и мощных космических гамма-всплесков [2].

Влияние мертвого времени можно уменьшить путем сегментирования детектора, т. е. сборки детектора из отдельных элементов (сегментов) меньшего размера, при том что общий объем (и масса) всех отдельных сегментированных элементов сцинтиллятора остается таким же, как и при использовании цельного куска сцинтиллятора.

С другой стороны, сегментированные детекторы гамма-излучения используются для измерения поляризации гамма-излучения с помощью комптоновского рассеяния [3].

В институте космических исследований разрабатывается сегментированный гамма-спектрометр (СГС) в составе полезной нагрузки малого космического аппарата Чибис-АИ, задачами которого являются регистрация гамма-вспышек земного происхождения и космических гамма-всплесков. Основным элементом детектора является набор брусков германата висмута (BGO), каждый из которых сопряжен с кремниевым фотоумножителем.

В работе рассмотрено моделирование матрицы отклика сегментированного детектора гамма-излучения в диапазоне от 50 кэВ до 10 МэВ с помощью программного пакета Geant4. При этом учтены процессы взаимодействия излучения с веществом в этом спектральном диапазоне.

Исследована возможность регистрации линейной поляризации таким детектором, а также оптимальные параметры сегментированного детектора для наиболее эффективной регистрации линейной поляризации гамма-излучения.

## Литература

1. *Fishman G. J.* [et al.]. Discovery of intense gamma-ray flashes of atmospheric origin // *Science*. 1994. V. 264(5163). P. 1313–1316.
2. *Minaev P., Pozanenko A., Chelovekov I.* GRB 221009A: Analysis of the initial episode using data of GBM/Fermi and SPI-ACS/INTEGRAL // GRB Coordinates Network. 2022. Circular Service. No. 32819.
3. *Kole M.* [et al.]. Gamma-ray polarization results of the POLAR mission and future prospects // Proc. 37th Intern. Cosmic Ray Conference (ICRC 2021). DOI: 10.22323/1.395.0600.

## Нуклеосинтез в сценарии слияния нейтронных звезд разных масс. Влияние ядерных данных на динамику процесса

*А. Ю. Игнатовский*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова  
национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

Последние стадии эволюции системы нейтронных звезд (НЗ), особенно после наблюдений результатов r-процесса в такой системе [1], являются основным сценарием для нуклеосинтеза тяжелых элементов. В общепринятой модели результатом взаимодействия двух НЗ является слияние [2–4] с образованием одной массивной НЗ или черной дыры (ЧД) и одновременным выбросом части вещества в виде джетов в межзвездную среду.

Если массы взаимодействующих НЗ значительно отличаются, то может реализоваться сценарий обдирания [5, 6], в котором при сближении компонентов системы НЗ меньшей массы первой заполняет полость Роша и начинает перетекать на более массивный компонент. По достижении нижнего предела масс НЗ [7] маломассивный компонент взрывается с образованием гамма-всплеска, полностью разлетаясь в межзвездную среду. Эта модель интересна тем, что количество выбрасываемого вещества равно нижнему пределу масс НЗ  $\sim 0,1 M_{\odot}$ , что на порядки превышает выброс вещества за счет джетов при слиянии НЗ.

В работе приведены результаты расчетов нуклеосинтеза тяжелых элементов в сценарии взрыва маломассивной НЗ в сценарии обдирания. Исследовалось влияние различных уравнений состояния вещества НЗ — BSk22 и BSk25 [8] на динамику разлета оболочки маломассивной НЗ. Показано, что характер распространения ударной волны и распространенность тяжелых элементов при развитии нуклеосинтеза во внутренних слоях внешней коры отличаются для разных уравнений состояния.

### Литература

1. *Abbot B. P.* [at el.]. Gravitational waves and gamma-rays from a binary neutron star merger: GW170817 and GRB 170817A // *Astroph. J. Lett.* 2017. V. 848(2): L. 13.
2. *Korobkin O., Rosswog S., Arcones A., Winteler C.* On the astrophysical robustness of the neutron star merger r-process // *MNRAS.* 2012. V. 426(3). P. 1940–1949.
3. *Rosswog S.* [at el.]. The long-term evolution of neutron star merger remnants — I. The impact of r-process nucleosynthesis // *MNRAS* 2014. V. 439(1). P. 744–756.
4. *Martin D.* [at el.]. Neutrino-driven winds in the aftermath of a neutron star merger: nucleosynthesis and electromagnetic transients // *Astroph. J.* 2015. V. 813(1): 2.
5. *Clark J. P. A., Eardley D. M.* Evolution of close neutron star binaries // *Astroph. J.* 1977. V. 215. P. 311–322.
6. *Blinnikov S. I., Nadyozhin D. K., Kramarev N. I., Yudin A. V.* Neutron star mergers and gamma-ray bursts: stripping model // *Astron. Rep.* 2021. V. 65(5). P. 385–391.
7. *Haensel P., Potekhin A. Yu., Yakovlev D. G.* Neutron stars 1: equation of state and structure. — New York: Springer, 2007.
8. *Pearson J. M.* [at el.]. Unified equations of state for cold non-accreting neutron stars with Brussels–Montreal functionals. I. Role of symmetry energy // *MNRAS.* 2019. V. 481. P. 2994–3026.

## Однородное свечение неба, наблюдаемое сквозь горловину кротовой норы

*П. Самородская, М. Бугаев, И. Новиков, С. Репин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)  
Астрокосмический центр ФИАН

«Кротовые норы» являются одним из решений уравнений Эйнштейна. Эти экзотические объекты представляют собой два асимптотически плоских пространства-времени, соединенных горловиной, лежащей вне нашего трехмерного пространства.

Рассмотрена задача о возможности наблюдения однородного свечения неба сквозь горловину кротовой норы Морриса–Торна наблюдателем, находящемся в другом асимптотически плоском простран-

стве-времени. Показано, что изображение светящегося неба имеет сложное строение и в нем присутствуют кольцевые структуры. Построено распределение интенсивности излучения в изображении. Кроме того, построено изображение кротовой норы Морриса–Торна на фоне однородного излучения неба в пространстве наблюдателя. После объединения обоих результатов построено синтетическое модельное изображение кротовой норы Морриса–Торна на фоне реликтового излучения, которое можно получить в реальных наблюдениях.

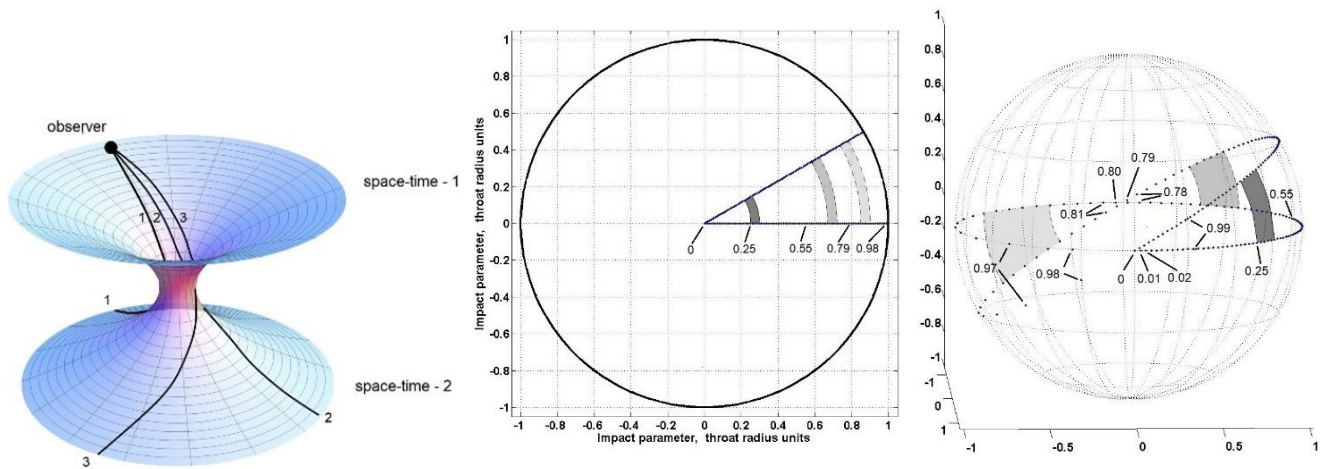


Рис. 1. Два асимптотически плоских пространства, связанные кротовой норой. Отклонение квантов с различными прицельными параметрами при прохождении сквозь горловину безмассовой кротовой норы

На рис. 1 слева схематически показано прохождение кванта сквозь горловину кротовой норы. На других панелях показаны кванты, отправленные сквозь горловину вдоль двух радиусов из пространства наблюдателя и положение этих же квантов после их прихода на небесную сферу пространства-2. Обратив ход луча, можно утверждать, что фрагмент узкого кольца внутри силуэта кротовой норы образуют кванты, излученные в пространстве-2 из соответствующего отмеченного участка небесной сферы, расположенного между двумя большими кругами. Три пары таких соответствующих друг другу фрагментов показаны на рисунке разной заливкой. Интенсивность изображения пропорциональна отношению площадей этих фрагментов, поэтому вблизи значения прицельного параметра  $b = 0,793$  наблюдается минимум излучения.

На рис. 2 слева показано распределение интенсивности излучения при наблюдении однородно светящегося неба (аналог реликтового излучения) сквозь горловину кротовой норы Морриса–Торна. На средней панели показан график распределения интенсивности вдоль радиуса. На правой панели показан тот же график, но в качестве радиальной координаты использована величина  $-\log_{10}(1 - b)$ , где  $b$  — прицельный параметр, выраженный в единицах радиуса горловины кротовой норы. Из этого графика понятно, что вблизи границ горловины появляется большое количество колец, образованных квантами, совершившими внутри горловины несколько полных оборотов. Хорошо выделяются четыре кольца.

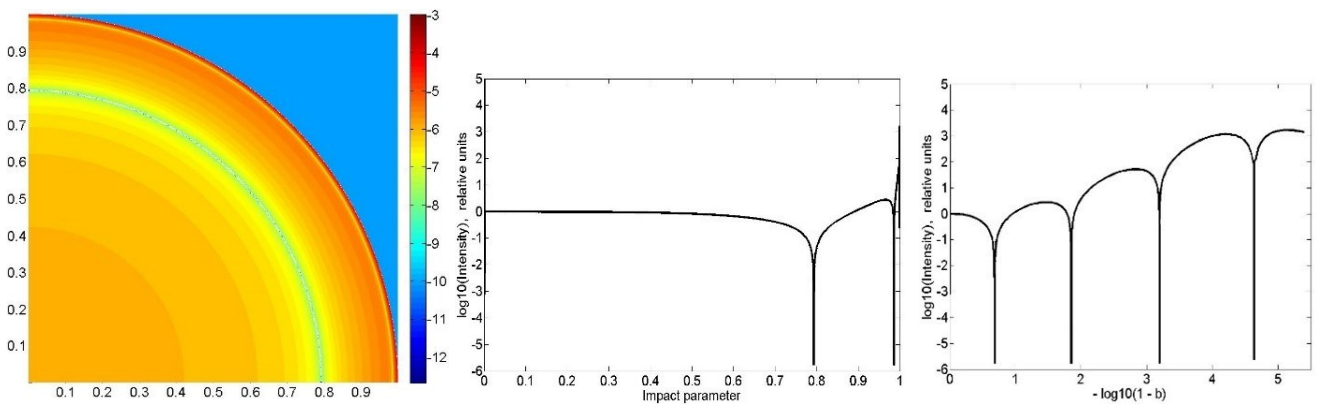


Рис. 2. Распределение интенсивности в изображении при наблюдении однородно светящегося неба сквозь горловину кротовой норы Морриса–Торна. Показан график распределение интенсивности по радиальной координате

Распределение интенсивности можно построить и для силуэта кротовой норы на фоне однородно светящегося неба в пространстве наблюдателя. На рис. 3 слева показано распределение интенсивности в

логарифмической шкале вблизи границ силуэта. Справа представлено синтетическое изображение, однако для показа большего количества деталей в качестве радиальной координаты использована величина  $-\log_{10}(1-b)$ . Интенсивность излучения, проходящего сквозь горловину, и того, что идет из пространства наблюдателя, являются независимыми величинами и поэтому показаны разными цветами.

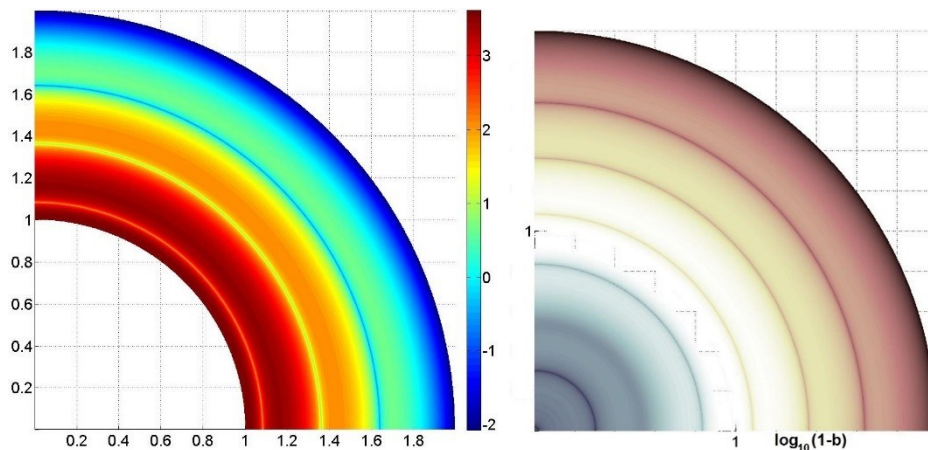


Рис. 3. Распределение интенсивности в изображении при наблюдении однородно светящегося неба в пространстве наблюдателя. Справа показано синтетическое изображение в координате  $-\log_{10}(1-b)$  по обеим осям

УДК 52-423

## Исследование аномального динамического трения в потенциале однородного эллипсоида

*П. В. Костина<sup>1</sup>, М. И. Зельников<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Объектом исследования данной работы является динамическое трение — явление, описанное в 1943 г. Чандрасекаром в одноименной статье [1] и представляющее собой эффект замедления некоторого одиночного массивного тела, попадающего в область, содержащую множество более легких объектов. Динамическое трение является следствием переноса энергии и импульса при попарном взаимодействии массивного тела с объектами системы. Суммарное воздействие таких взаимодействий и приводит к замедлению движения основного тела. При этом динамическое трение в приближении Чандрасекара не дает полного описания всех эффектов замедления, свойственных динамическому трению — в динамическом трении возникают аномалии, которые не могут быть описаны формулой Чандрасекара.

Практическими свидетельствами существования аномалий динамического трения могут служить результаты численного счета: например, в статье о формировании ядра галактик массивными объектами [2] численные решения задачи воздействия  $N$  тел на массивный объект демонстрируют замедление исследуемого объекта с выходом, вместо предполагаемой остановки в центре системы, на некоторую флуктуирующую орбиту — т. е. на определенном уровне можно наблюдать аномальное исчезновение трения. При этом данные предсказания имеют предположительное наблюдаемое подтверждение — эллиптическая карликовая галактика в созвездии Печи (Fornax dSph) имеет несколько внешних шаровых скоплений, влияние на которые стандартного динамического трения должно было заставить две из них продолжительное время назад опуститься к центру галактики. Однако несмотря на их предполагаемый по составу возраст, скопления наблюдаются на удалении от центра [3]. Одним из возможных объяснений данного феномена и являются аномалии динамического трения.

Основная цель данной работы — количественное описание аномального динамического трения, в частности нахождение для этого эффекта приближенной формулы из численных вычислений. При рассмотрении эволюции системы можно отталкиваться от модели системы из  $N$  тел, одинаковых по своим свойствам, и при построении системы уравнений Боголюбова и приведении ее в приближении к системе двух взаимодействующих тел возникает необходимость вычисления интеграла, входящего в кинетическое уравнение

$$A_{\bar{k}\bar{k}_1}(\bar{J}, \bar{J}_1) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int u \left[ \bar{r}(\bar{J}, \bar{\theta}) - \bar{r}(\bar{J}_1, \bar{\theta}_1) \right] \cdot e^{-i(\bar{k}\bar{\theta} - \bar{k}_1\bar{\theta}_1)} d\bar{\theta} d\bar{\theta}_1, \quad (1)$$

$$A_{\bar{k}\bar{k}_1}(\bar{J}, \bar{J}_1) = \frac{-G}{(2\pi)^6} \int d\bar{\theta} d\bar{\theta}_1 e^{-i\bar{k}\bar{\theta} + i\bar{k}_1\bar{\theta}_1} \cdot \frac{1}{\left[ \sum_i \left( (2J_i)^{1/2} \sin \theta_i - (2J_{1i})^{1/2} \sin \theta_{1i} \right)^2 \right]^{1/2}}. \quad (2)$$

При этом после разложения исследуемого потенциала в ряд Фурье (1) сила динамического трения определяется однозначно, что сводит задачу получения приближенного вида динамического трения в потенциале эллипсоида к нахождению фурье-коэффициентов потенциала, представленных в виде шестимерного тригонометрического интеграла (2).

Из этого следует, что для нахождения приближения динамического трения необходима реализация численного счета множества серий вычислений шестимерного интеграла (для получения необходимого набора точек, используемого для аппроксимации). В данной работе используется реализация на языке Python адаптивного алгоритма численного интегрирования многомерных интегралов, на основе которого при оптимизации работы с использованием параллельных вычислений и фильтрацией точек вычисления реализуется программа численного счета множества шестимерных интегралов и дальнейшей аппроксимации результатов с помощью функции-полинома от величин  $J$  и  $J_1$  (переменные действия в системе «действие–угол» для рассматриваемого взаимодействия двух тел). Результаты аппроксимации искомых коэффициентов полиномом показывают сходство с асимптотическим поведением вычисляемого интеграла, а добавление некоторого количества опорных точек позволяет повысить точность совпадения поведения аппроксимации с искомой функцией. Получаемый результат работы программы при использовании в качестве приближения фурье-коэффициентов позволит получить приближение динамического трения.

### Литература

1. Chandrasekhar S. Dynamical friction. I. General considerations: the coefficient of dynamical friction // *Astrophys. J.* 1943. V. 97. P. 255–262.
2. Goerdt T. [et al.]. Core creation in galaxies and halos via sinking massive objects // *Astrophys. J.* 2010. V. 725. P. 1707–1716.
3. Cole D. R. [et al.]. The mass distribution of the Fornax dSph: constraints from its globular cluster distribution // *MNRAS.* 2012. V. 426(1). P. 601–613.

УДК 533.95

## Трансформации энергии и неидеальные электрические поля в сверхтонких токовых слоях по наблюдениям миссии MMS в хвосте Земной магнитосферы

*М. В. Леоненко*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт космических исследований РАН

Процесс магнитного пересоединения является наиболее интенсивным механизмом преобразования энергии в космической плазме [1]. Вложенные сверхтонкие токовые слои (СТС) на электронных кинетических масштабах могут накапливать значительное количество свободной энергии [2], выделение которой может приводить к нагреву и ускорению локальной популяции плазмы, а также влиять на анизотропию функции распределения частиц.

В работе проводится исследование 95 пересечений СТС в хвосте Земной магнитосферы по данным миссии MMS [3]. Исследуемые СТС наблюдаются совместно с быстрыми плазменными потоками к и от Земли со скоростями до ~ 1300 км/с, во время фазы роста магнитной суббури. Полутолщина СТС составляет порядка нескольких гирорадиусов тепловых электронов  $\rho_e$ . Большинство исследуемых СТС наблюдаются с параметром адиабатичности  $\kappa_e < 1$ , что свидетельствует о размагниченной динамике электронов.

На малых электронных кинетических масштабах возможно нарушение условия вмороженности плазмы. Нарушение вмороженности плазмы приводит к появлению неидеальных электрических полей. Наблюдается присутствие неидеальных электрических полей выше 10 мВ/м внутри большинства СТС в статистике.

Трансформация энергии в СТС характеризуется объемной плотностью мощности изменения кинетической энергии частиц и описывается выражением  $(\mathbf{j}, \mathbf{E}')$ , где  $\mathbf{E}'$  — неидеальное электрическое поле. Положительный знак параметра  $(\mathbf{j}, \mathbf{E}')$  характеризует передачу энергии от поля к частицам, отрицательный знак — от частиц к полю. Статистический анализ показал, что вероятность наблюдения заданного значения  $(\mathbf{j}, \mathbf{E}')$  распределена квазинормально с шириной  $\sim 0,2$  нВт/м<sup>3</sup>. В отдельных событиях наблюдается мощность до  $\sim 0,6$  нВт/м<sup>3</sup>, что свидетельствует о интенсивном преобразовании энергии вне области пересоединения (в современных работах сообщается о наблюдении мощности трансформации энергии  $\sim 1,0 \div 2,0$  нВт/м<sup>3</sup> внутри диффузионной области [4]). Полученные результаты показывают, что интенсивное преобразование энергии с последующим накоплением и выделением энергии возможно вне области пересоединения. Некоторые наблюдаемые СТС могут быть неустойчивы и нестационарны.

Показано, что наблюдение разного знака параметра  $(\mathbf{j}, \mathbf{E}')$  является равновероятным, что свидетельствует о равновероятности протекания процессов трансформации энергии электромагнитного поля в кинетическую энергию электронов и наоборот. В большинстве исследуемых СТС наблюдаются незначительная величина параметра  $(\mathbf{j}, \mathbf{E}')$   $\sim 0,1$  нВт/м<sup>3</sup>, что свидетельствует о их квазистационарности на характерных временах наблюдения слоя ( $\sim 1 \div 5$  с).

В работе были рассчитаны дивергенция и ротор неидеального электрического поля, который характеризует природу наблюдаемых полей. Наблюдаются значения  $\text{div } \mathbf{E}$  и  $\text{rot } \mathbf{E} \sim 1000$  нТл/с. Данные величины свидетельствуют в том, что неидеальные электрические поля являются электростатическими и индукционными. Присутствие индукционных электрических полей свидетельствует о возможных временных нестационарностях СТС.

### Литература

1. *Angelopoulos V.* [et al.]. Tail reconnection triggering substorm onset // Science. 2008. V. 321(5891). P. 931–935.
2. *Zelenyi L.* [et al.]. Marginal stability of thin current sheets in the Earth's magnetotail // J. Atmos. Sol. Terr. Phys. 2008. V. 70(2–4). P. 325–333.
3. *Leonenko M. V.* [et al.]. MMS observations of super thin electron-scale current sheets in the Earth's magnetotail // J. Geophys. Res.: Space Phys. 2021. V. 126: e2021JA029641.
4. *Li X.* [et al.]. Three-dimensional network of filamentary currents and super-thermal electrons during magnetotail magnetic reconnection // Nat. Commun. 2022. V. 13(1): 3241.

УДК 533.9.01

### Исследование динамики магнитоакустических волн в неадиабатической плазме при наличии нагрева, зависящего от магнитного поля

*Д. В. Агапова<sup>1,2</sup>, Д. И. Завершинский<sup>1,2</sup>, С. А. Белов<sup>2</sup>, Н. Е. Молевич<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева (Самарский университет)

<sup>2</sup>СФ ФИАН

В данной работе проводится исследование динамики магнитоакустических (МА) волн в неадиабатической плазме, примером которой является солнечная корона. Неадиабатичность корональной плазмы является следствием протекающих различных внутренних процессов. В настоящей работе рассматривается влияние нагрева и радиационного охлаждения, зависящие от параметров плазмы [1–3], на динамику магнитоакустических (МА) волн. Одним из следствий данной зависимости является появление обратной связи между МА-возмущениями и активной средой [4]. При определенных параметрах источника теплового выделения обратная связь может стать положительной или отрицательной, что приводит к росту или затуханию МА-возмущений соответственно [5, 6]. Неустойчивости такого рода называются тепловыми. Другим следствием является дисперсия фазовой скорости и декрементов (инкрементов) МА-возмущений. Это связано с наличием в системе характерного времени нагрева среды. Данное время определяет характерную частоту, по отношению к которой весь спектр частот можно разделить на низкочастотный и высокочастотный диапазон. Распространение звука в низкочастотной части спектра в отличие от высокочастотной будет определяться параметрами источника, а именно, будет определяться не классическим выражением для адиабатической трубочной скорости, а модифицированным выражением [7].

Все ранее проведенные исследования динамики МА-волн в плазменном слое с тепловым дисбалансом были выполнены на основе предположения, что нагрев и охлаждение определяются только зависимостью от локальной плотности и температуры плазмы. Мы расширили данные исследования и рассмотрели зависимость функции нагрева не только от плотности и температуры плазмы, но и от напряженности магнитного поля. В результате было получено дисперсионное соотношение, которое описывает динамику МА-волн. Из анализа численного решения уравнений для характерных параметров «теплых» корональных петель было показано, что фазовая скорость медленных волн подвержена существенному влиянию не только дисперсии из-за конечной ширины плазменного слоя, но и дисперсии, определяемой тепловым дисбалансом. Было установлено, что модифицированная трубчатая скорость может принимать разные значения в зависимости от различных видов функциональной зависимости нагрева, от величины магнитного поля. Для «сильных» магнитных полей, где  $\beta \approx 0,03$ , для «теплых» корональных петель разница в значениях модифицированной трубчатой скорости исчезает.

В работе рассматривался режим, связанный с затуханием МА-волн в корональной плазме. Для данного случая медленные МА-волны, как и прежде, подвержены более сильному затуханию, чем быстрые. Наибольшее время затухания медленных волн прослеживается для «сильных» магнитных полей вне зависимости от сценария нагрева. При этом были определены следующие зависимости: так, время затухания медленных МА-волн уменьшается с увеличением показателя степенной зависимости мощности нагрева от магнитного поля. Для быстрых МА-волн время затухания растет с уменьшением показателя степенной зависимости от магнитного поля.

Работа частично поддержана Министерством образования и науки (проекты № FSSS-2023-0009, 0023-2019-0003).

### Литература

1. *Del Zanna G.* CHIANTI — an atomic database for emission lines. XVI. Version 10, further extensions // *Astrophys. J.* 2021. V. 909(1): 38.
2. *Rosner R.* Dynamics of the quiescent solar corona // *Astrophys. J.* 1978. V. 220. P. 643–645.
3. *Carbonell M.* Spatial damping of linear non-adiabatic magnetoacoustic waves in a prominence medium // *Astron. Astrophys.* 2006. V. 460(2). P. 573–581.
4. *Zavershinskii D. I.* [et al.]. Formation of quasi-periodic slow magnetoacoustic wave trains by the heating/cooling misbalance // *Phys. Plasma.* 2019. V. 26(8): 082113.
5. *Field G. B.* George Thermal Instability // *Astroph. J.* 1965. V. 142. P. 531–567.
6. *Molevich N. E., Oraevsky A. N.* Sound viscosity in media in thermodynamic disequilibrium // *Sov. Phys. JETP.* 1988. V. 67(3). P. 504–508.
7. *Belov S. A.* [et al.]. Dispersion of slow magnetoacoustic waves in the active region fan loops introduced by thermal misbalance // *Sol. Phys.* 2019. V. 296(8): 122.

УДК 526.6-34

### Искажение формы далеких объектов при случайном выборе пробных лучей

*А. Р. Гриненко<sup>1</sup>, К. Н. Хмелевский<sup>1,2</sup>, С. В. Репин<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

При наблюдении далеких астрофизических объектов их изображения могут искажаться из-за линзирования лучей звездами нашей Галактики. Отдельная звезда вносит в среднем малый вклад в отклонение луча, однако влияние большого количества звезд может приводить к существенным искажениям.

В работе исследовано влияние звезд галактического диска при наблюдении объекта, расположенного перпендикулярно галактической плоскости. В качестве такого объекта можно привести известную галактику М87. Мы считаем лучи условно прямолинейными и учитываем вклад в малое отклонение от этой прямой каждой звезды, находящейся на расстоянии до 100 пк от луча. Суммируя полученные векторы отклонений каждой звездой, можно определить суммарное отклонение конкретного луча.

Звезда отклоняет луч на угол

$$\varphi = \frac{4Gm}{c^2 d},$$



где  $m$  — это масса звезды;  $d$  — прицельный параметр;  $G$  — гравитационная постоянная;  $c$  — скорость света [1]. Эта формула выведена с учетом эффектов общей теории относительности и искривления пространства. Классическая механика предсказывает вдвое меньший результат.

Типичная картина искажений равномерной сетки звездами галактического диска представлена на рис. 1. Для наглядности реальные отклонения увеличены в 100 раз, в результате чего видны отклонения, вызванные отдельными звездами. При построении модели использована функция масс звезд из работы [2]. Согласно полученным результатам суммарное отклонение луча звездами диска составляет 5–10 микросекунд дуги. При этом значения отклонений для близких лучей сильно коррелированы, поскольку их отклоняют, по сути, одни и те же звезды. Это значит, что объекты с малыми угловыми размерами (порядка наносекунды), такие как диски звезд, сдвигаются как единое целое, и их форма при этом не меняется. Для объектов с угловыми размерами порядка миллисекунды или десятков миллисекунд искажения малы по сравнению с их угловыми размерами, и их форму тоже можно считать неизменной.

Были получены результаты для сетки со случайным распределением точек (рис. 1) и проведено сравнение с аналогичным результатом для другого распределения: точки в форме решетки с квадратной ячейкой. Кривая с коэффициентом корреляции, уменьшающимся при увеличении масштаба сетки, показана на рис. 2.

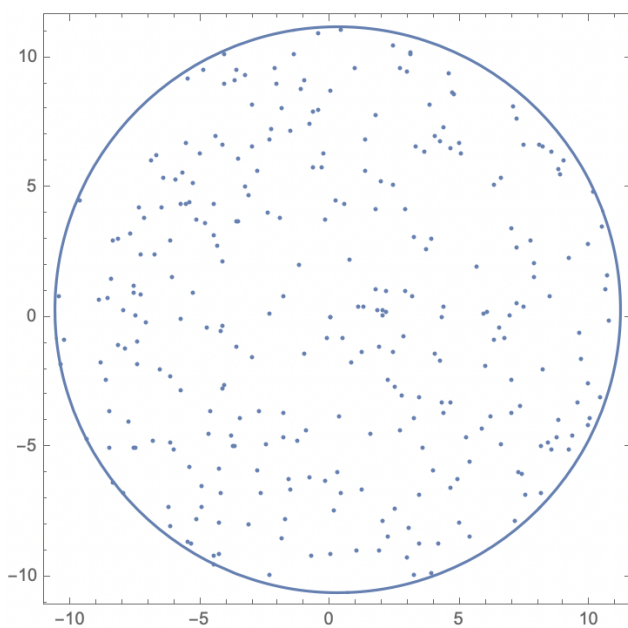


Рис. 1. Случайное распределение точек

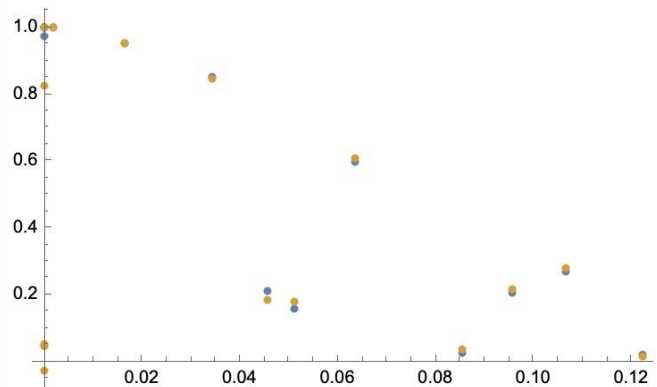


Рис. 2. График зависимости коэффициента корреляции в зависимости от шага сетки

Для объектов с угловыми размерами в десятки и сотни микросекунд искажение формы может быть существенным. Такие угловые размеры имеют тесные двойные системы в соседних галактиках или ближайšie сверхмассивные черные дыры.

Картина может меняться со временем из-за движения звезд — как из-за их вращения вокруг центра Галактики, так и из-за пекулярных движений. Характерное время изменения картины искажений составляет порядка 100 дней. Это значит, что рассмотренный эффект нужно учитывать при проведении прецизионных измерений относительных положений близких объектов.

Для этого измеряется траектория отдельного луча: он будет смещаться и со временем будет описывать какую-то траекторию: картина будет «дрожать».

## Литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Курс теоретической физики. В 10 томах. Том 2. Теория поля. — М.: Физматлит, 2012.
2. Einasto J., Haud U. Galactic models with massive corona. I — Method. II — *Galaxy//Astron. Astrophys.* 1989. V. 223(1–2). P. 89–106.
3. Chabrier G., Domonque C. Determination of the globular cluster and halo stellar mass functions and stellar and brown dwarf densities // *Astron. Astrophys.* 1997. V. 328. P. 83–94.

## Модель двуслойной жидкости с неоднородными термодинамическими свойствами

М. А. Юденкова<sup>2,1</sup>, Д. А. Климачков<sup>2</sup>, А. С. Петросян<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт космических исследований РАН

В геофизической гидродинамике одним из фундаментальных методов изучения крупномасштабных волн в атмосферах планет и океанов является приближение мелкой воды. В работе рассматривается двуслойное стратифицированное течение. Нижний слой жидкости является несжимаемым с постоянными температурой, плотностью и давлением. В верхнем слое жидкости температура линейна по высоте, а плотность и давление определяются нелинейными функциями. Сжимаемый слой определяет геометрию подстилающей поверхности для верхнего слоя, а сжимаемый слой создает дополнительное давление на нижний слой.

В работе получена система квазилинейных дифференциальных уравнений для двуслойного течения. Переменными системы являются скорости жидкости верхнего и нижнего слоев, высота нижнего слоя и новой переменной  $l = h\bar{\rho}$ . Рассматриваются два типа вращения:  $f$ -плоскость с постоянным параметром Кориолиса и  $\beta$ -плоскость с параметром Кориолиса, линейным по широте. На  $f$ -плоскости получены решения в виде двух волн Пуанкаре. Дисперсионные соотношения для этих волн имеют вид

$$\omega = \pm \sqrt{f_0^2 + k^2 \left( \frac{a_0^2 g + h_0 g}{2} \pm \frac{g}{2\sqrt{\rho}} \sqrt{4h_0 l_0 + \rho(a_0^2 + h)^2} \right)}.$$

На  $\beta$ -плоскости получены линейные решения в виде двух волн Пуанкаре и волны Россби. Уравнения для волн Пуанкаре в высокочастотном пределе совпадают с советующими уравнениями на  $f$ -плоскости. Уравнение для волны Россби имеет вид

$$\omega = \frac{-\beta k_x g (a_0^2 + h)}{2f_0^2 + (a_0^2 + h)gk^2}.$$

Отметим отличия полученных волн в двуслойном приближении от однослойного приближения сжимаемой жидкости [1]. В дисперсионном соотношении для волн Россби изменяется лишь гравитационный параметр: он представлен в виде суммы параметров двух слоев  $a_0^2 + h$ . Дисперсионные соотношения для волн Пуанкаре имеют качественно иной вид. В двуслойном приближении решения получены в виде двух волн Пуанкаре с различным асимптотическим поведением. В отличие от волн в однослойном приближении, они могут вступать в резонанс.

Качественный анализ дисперсионных соотношений показал, что на  $f$ -плоскости возможны трехволновые взаимодействия волн Пуанкаре, а на бета-плоскости возможны все возможные конфигурации трехволновых взаимодействий волн. Особый интерес представляет взаимодействие трех волн Пуанкаре и двух волн Пуанкаре с волной Россби, которых не наблюдается в однослойном течении сжимаемой жидкости [1]. 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.

Работа поддержана фондом развития теоретической физики и математики «Базис».

### Литература

1. Юденкова М. А., Климачков Д. А., Петросян А. С. Волны Пуанкаре и волны Россби в сжимаемых течениях мелкой воды // ЖЭТФ. 2022. Т. 161. №3. С. 388–402.

## Возможность регистрации позитронов и электронов галактических космических лучей в тераэлектронвольтовом диапазоне энергий с помощью их синхротронного излучения в магнитном поле Земли

*А. П. Стужин, В. В. Михайлов*

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

Современные эксперименты по регистрации космических лучей, такие как AMS-02, FERMI, CALET, способны эффективно измерять поток позитронов и электронов вплоть до энергий  $\sim 1$  ТэВ. В связи с техническими и конструктивными трудностями методы регистрации, используемые в данных экспериментах, не позволяют расширить исследуемый энергетический диапазон в тераэлектронвольтовую область. Однако это необходимо, например, для объяснения аномального эффекта, который обнаружен в эксперименте PAMELA и заключается в росте отношения потока позитронов к суммарному электрон-позитронному потоку галактических космических лучей (ГКЛ) при энергиях  $>10$  ТэВ [1]. Поэтому разработка детекторов, способных регистрировать позитроны и электроны ГКЛ в диапазоне энергий  $1 \div 10$  ТэВ и выше, является важной задачей современной астрофизики высоких энергий.

Перспективной является методика регистрации электронов с использованием их синхротронного излучения в геомагнитном поле, предложенная в работе [2].

В нашей работе проведена оценка темпа счета детектора, использующего эту методику для регистрации электронов и позитронов в диапазоне энергий  $1 \div 4,5$  ТэВ, а также исследована возможность восстановления энергии позитронов по регистрации синхротронных фотонов, испущенных ими.

Энергетический спектр синхротронных фотонов связан с энергией  $E_0$  (ТэВ) позитронов или электронов, которые их испустили в магнитном поле с перпендикулярной составляющей  $B_{\perp}$ , следующим соотношением:

$$\frac{dN_{\gamma}(E_{\gamma})}{dE_{\gamma}} = \frac{3,53 \times 10^5}{E_{\gamma}} \left(\frac{E_{\gamma}}{E_c}\right) \times \int_{E_{\gamma}/E_c}^{\infty} K_{5/3}(\chi) d\chi, \quad (1)$$

где  $F\left(\frac{E_{\gamma}}{E_c}\right) = \left(\frac{E_{\gamma}}{E_c}\right) \times \int_{E_{\gamma}/E_c}^{\infty} K_{5/3}(\chi) d\chi$  задает спектр синхротронного излучения электрона или позитрона;  $E_c = 6,56 \times 10^{-2} B_{\perp} E_0^2$  МэВ;  $K_{5/3}(\chi)$  — функция Бесселя второго типа [3].

Было проведено численное моделирование детектирования позитронов посредством регистрации их синхротронного излучения детектором площадью  $2 \times 2$  м<sup>2</sup>, расположенным на околоземной орбите МКС с наклоном  $51,6^{\circ}$  и высоте 400 км над Землей. Энергии позитронов восстанавливались исходя из энергий синхротронных фотонов. На рис. 1 приведены зависимости относительной ошибки восстановления энергии позитронов от их энергии.

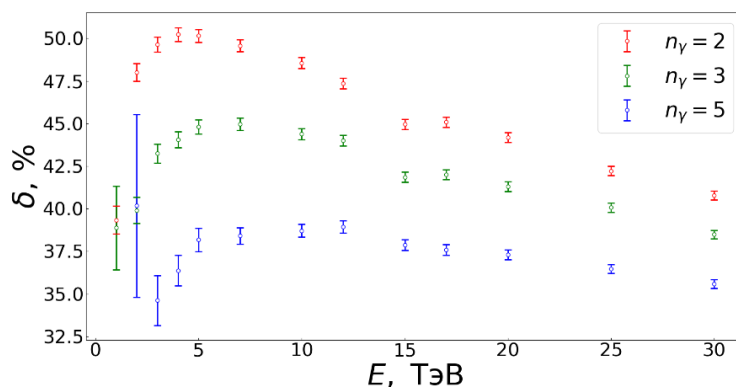


Рис. 1. Зависимости относительной ошибки восстановления энергии позитрона от энергии

Зависимости показывают, что ошибка определения энергии позитрона тем меньше, чем больше будет количество зарегистрированных синхротронных фотонов. Начиная с 5 ТэВ и при дальнейшем росте энергии позитрона, относительная ошибка снижается. Таким образом, точность восстановления энергии позитронов по энергии их синхротронных фотонов выше для больших энергий.

На данное время нет экспериментальных данных о потоке позитронов ГКЛ в тераэлектронвольтовом диапазоне энергий. Поэтому для оценки темпа счета детектора использовались данные экспериментов

CALET, DAMPE и FERMI о суммарном электрон-позитронном потоке галактических космических лучей [4–6]. Регистрация частиц моделировалась для детектора площадью  $2 \times 2 \text{ м}^2$  на высоте 400 км над Землей. Исследовалась орбита МКС с наклоном  $51,6^\circ$  и орбита планируемой российской орбитальной станции РОСС с наклоном  $96,9^\circ$ . Эффективность и энергетический диапазон регистрации синхротронных фотонов были выбраны равными 80% и  $1 \div 10^3 \text{ кэВ}$  соответственно. На рис. 2 приведены усредненные по данным трех экспериментов годовые интегральные темпы счета детектора  $N$  в зависимости от энергии частиц, построенные для случая регистрации не менее двух ( $n_\gamma = 2$ ) и не менее пяти ( $n_\gamma = 5$ ) синхротронных фотонов.

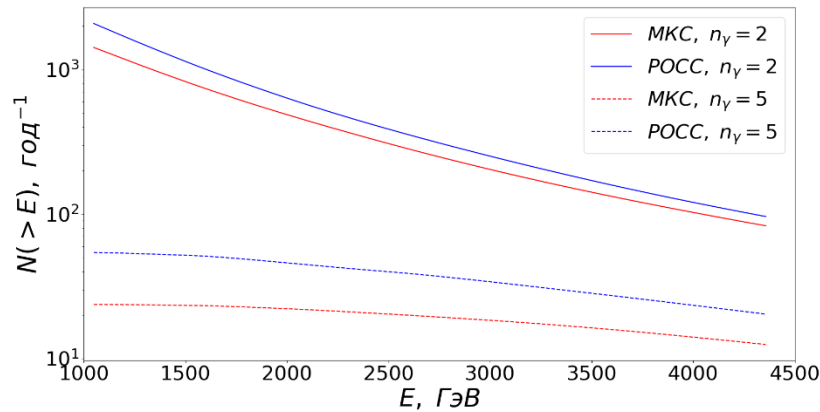


Рис. 2. Зависимости интегрального темпа счета детектора от энергии частиц.

Из рисунка видно, что темп счета для орбиты РОСС выше, чем для МКС. Эффективность регистрации для  $n_\gamma = 2$  в полтора-два раза выше, чем для  $n_\gamma = 5$ , но, как видно из рис. 1, при малом числе фотонов необходимо проводить независимое измерение энергии позитронов и электронов для улучшения энергетического разрешения.

### Литература

1. *Adriani O., Barbarino G., Bazilevskaya G.* [et al.]. An anomalous positron abundance in cosmic rays with energies 1.5–100 GeV // *Nature*. 2009. V. 458. P. 607–609.
2. *Prilutskii O. F.* The possibility of registering primary cosmic electrons by means of synchrotron radiation in the geomagnetic field // *JTEP Lett*. 1972. V. 16(8). P. 452–454.
3. *Stephens S. A., Balasubrahmanyam V. K.* Earth's magnetic field as a radiator to detect cosmic ray electrons of energy  $>10^{12} \text{ eV}$  // *J. Geophys. Res.* 1983. V. 88(A10). P. 7811–7822.
4. *Adriani O.* [et al., CALET Collaboration]. Extended measurement of the cosmic-ray electron and positron spectrum from 11 GeV to 4,8 TeV with the calorimetric electron telescope on the international space station // *Phys. Rev. Lett.* 2018. V. 120: 261102.
5. *Ambrosi G.* [et al., DAMPE Collaboration]. Direct detection of a break in the teraelectronvolt cosmic-ray spectrum of electrons and positrons // *Nature*. 2017. V. 552.
6. *Abdollahi S.* [et al., Fermi-LAT Collaboration]. Cosmic-ray electron-positron spectrum from 7 GeV to 2 TeV with the Fermi Large Area Telescope // *Phys. Rev. D*. 2017. V. 95: 082007.

УДК 523.985.3

### Исследование эволюции характеристик магнитного поля и электрических токов в активной области Солнца

*В. С. Зубик<sup>1</sup>, И. В. Зимовец<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт космических исследований РАН

Исследование эволюции активных областей (АО) Солнца — важная задача, так как может усовершенствовать понимание явлений энерговыделения, происходящих на Солнце, а также улучшить способы предсказания солнечных вспышек.

В данной работе исследовалась эволюция магнитного поля и электрического тока в АО NOAA 11675, в пике активности которой в 15:45 17.02.2013 произошла вспышка класса M1.9. В качестве граничных данных использованы фотосферные векторные магнитограммы прибора SDO/HMI [1]. Выполнена экстраполяция магнитного поля с фотосферы Солнца в корону с помощью пакета GX Simulator в двух приближениях: потенциальном и нелинейном бессиловом [2].

Для полученных данных были рассчитаны безразмерные параметры: отношение полной магнитной энергии в нелинейном приближении к полной энергии в потенциальном, средний дробный поток, а также средний взвешенный по току угол. Рассчитанные для всего промежутка времени результаты были сравнены со схожими параметрами из других работ [3, 4].

В рамках этих приближений получены временные зависимости интегральных магнитных энергий в активной области в интервале времени с 00:00 15.02.2013 до 23:00 19.02.2013, на основе чего определена временная зависимость свободной магнитной энергии как разность между энергией нелинейного бессилового и потенциального поля. Дополнительно получены распределения плотности электрического тока для этого промежутка времени. Также выполнено сравнение временных профилей характеристик магнитной энергии, электрического тока и потоков ультрафиолетового излучения по данным SDO/AIA [5] в рассматриваемой активной области. На основе этого обсуждаются процессы накопления и выделения свободной магнитной энергии, связанной с эволюцией токов в рассматриваемой АО.

### Литература

1. Scherrer P.H. [et al.]. The Helioseismic and Magnetic Imager (HMI) investigation for the Solar Dynamics Observatory (SDO) // Sol. Phys. 2012. V. 275. P. 207–227.
2. Stupishin A. Magnetic Field Library: NLFFF and magnetic lines // Zenodo [сайт]. DOI: 10.5281/zenodo.3896222.
3. Rudenko G.V., Myshyakov I.I. Analysis of reconstruction methods for nonlinear force-free fields // Sol. Phys. 2009, V. 257. P. 287–304.
4. Schrijver C.J. Nonlinear force-free field modeling of a solar active region around the time of a major flare and coronal mass ejection // Astrophys. J. 2007. V. 675. P. 1637–1644.
5. Lemen J.R. [et al.]. The Atmospheric Imaging Assembly (AIA) on the Solar Dynamics Observatory (SDO) // Sol. Phys. 2012. V. 275. P. 17–40.

УДК 524.352

## Определение расстояния по сверхновым

*А. И. Гимаев*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Определение расстояний в астрономии является важнейшей задачей. Благодаря сверхновым появляется возможность независимого измерения расстояний. В связи с ростом возможностей наблюдательной астрономии появляется все больше наблюдательных фотометрических и спектроскопических данных для решения этой задачи.

В данной работе моделируется взрыв сверхновой SN2017eaw, которая находится в галактике NGC 6946, с помощью радиационно-гидродинамического кода STELLA. По результатам моделирования и спектрофотометрическим данным мы оценили расстояние до SN2017eaw методом расширяющихся фотосфер (ЕРМ), являющимся прямым методом и независимым от предыдущих ступеней лестницы космологических расстояний. Также расстояние оценивалось с помощью метода стандартной свечи (SCM). Произведено сравнение наших результатов с результатами других авторов.

### Литература

1. Kirshner R.P., Kwan J. Distances to extragalactic supernovae // Astrophys. J. 1974. V. 193. P. 27–36.
2. Eastman R.G., Schmidt B.P., Kirshner R. The atmospheres of type II supernovae and the expanding photosphere method // Astrophys. J. 1996. V. 466(2). P. 911–937.
3. Dessart L., Hillier D.J. Distance determinations using type II supernovae and the expanding photosphere method // Astron. Astrophys. 2005. V. 439. P. 671–685.

## Исследование спектра космического рентгеновского фона по данным боковой засветки архива наблюдений обсерватории NuSTAR

А. А. Мухин<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт космической физики РАН

<sup>3</sup>Институт ядерной физики РАН

Несфокусированная засветка, регистрируемая космической рентгеновской обсерваторией NuSTAR, может быть источником полезной информации о космическом рентгеновском фоне (КРФ). Из-за особенностей геометрии телескопа несфокусированная засветка имеет пространственное распределение, структура которой в плоскости детектора в случае изотропного излучения имеет постоянную форму, что позволяет отделить ее от плоского инструментального шума [1]. Данная особенность позволяет разделить две компоненты сигнала в случае отсутствия других ярких источников в данном наблюдении.

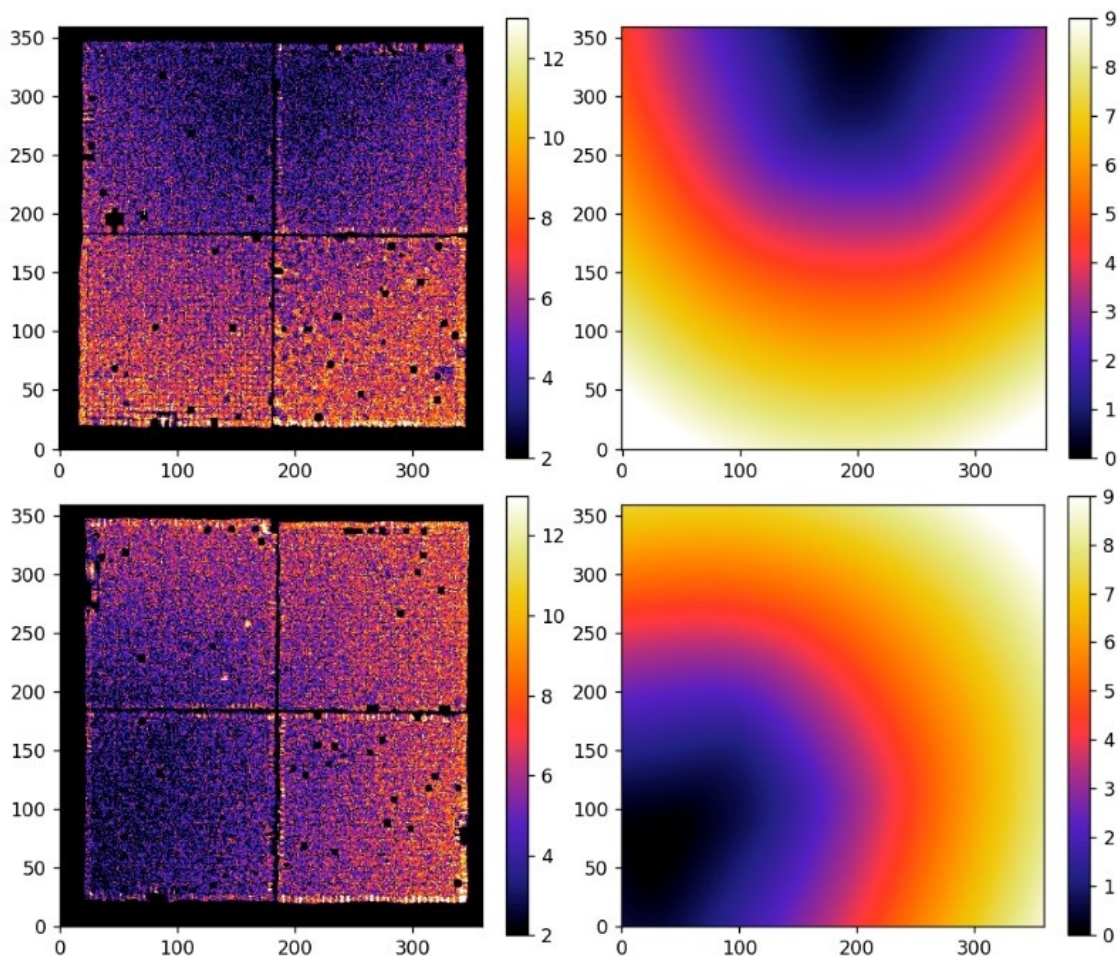


Рис. 1. Форма пространственного профиля изотропной боковой засветки (справа), отвечающая угловому размеру открытого участка неба для каждого пикселя детектора в квадратных градусах и пример распределения сигнала на детекторе для глубоких наблюдений (слева). Верхние рисунки отвечают детектору А, а нижние — детектору В телескопа NuSTAR

Процедура выделения сигнала КРФ осуществляется посредством решения задачи максимизации правдоподобия [2]. В качестве модели используется мат. ожидание регистрируемого сигнала, состоящее из двух компонент: плоской компоненты инструментального фона и зависящей от координаты на детекторе компоненты несфокусированного излучения, которая и является КРФ.

В результате оптимизации для нескольких энергетических отрезков получается спектр излучения в диапазоне 3–20 кэВ.

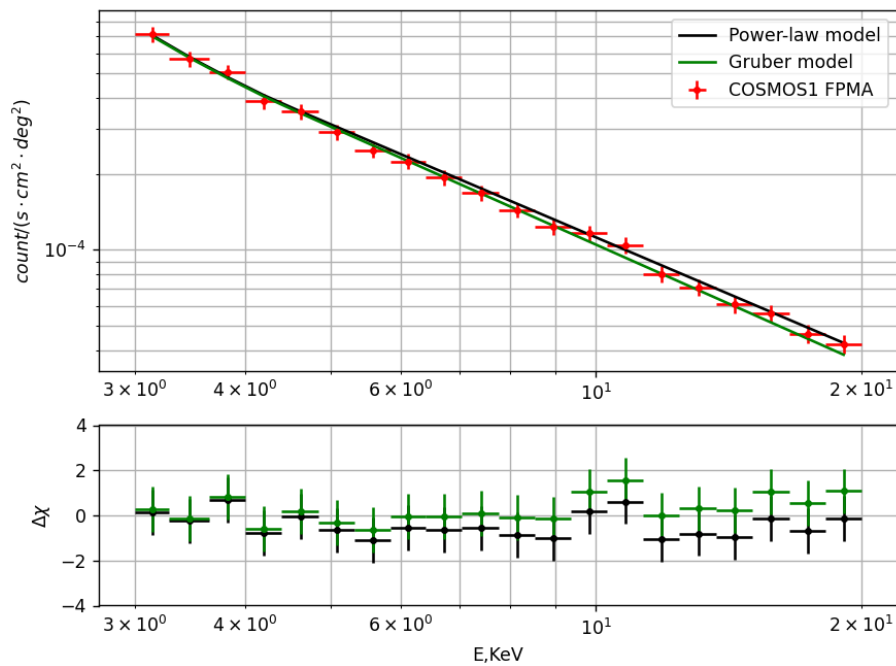


Рис. 2. Спектр КРФ, полученный методом максимизации правдоподобия на наблюдениях глубокого поля COSMOS. Черная линия отвечает аппроксимации простым степенным законом, а зеленая — моделью Грубера [3]. Нижний график демонстрирует отклонение полученных точек от соответствующих моделей

Для получения спектров высокой точности необходимо как можно большая экспозиция наблюдений. Для исследования КРФ обычно используются глубокие наблюдения без точечных или протяженных источников. Для увеличения экспозиции можно, однако, использовать и наблюдения, содержащие сфокусированную компоненту, но для этого необходимо очищать их от любого сфокусированного сигнала перед включением в процедуру оптимизации.

В данной работе представлен автоматизированный метод для очистки наблюдений NuSTAR от любого сфокусированного рентгеновского потока при помощи вейвлет декомпозиции [4] изображения, которая позволяет детектировать структуры произвольной формы и пространственного масштаба без участия человека.

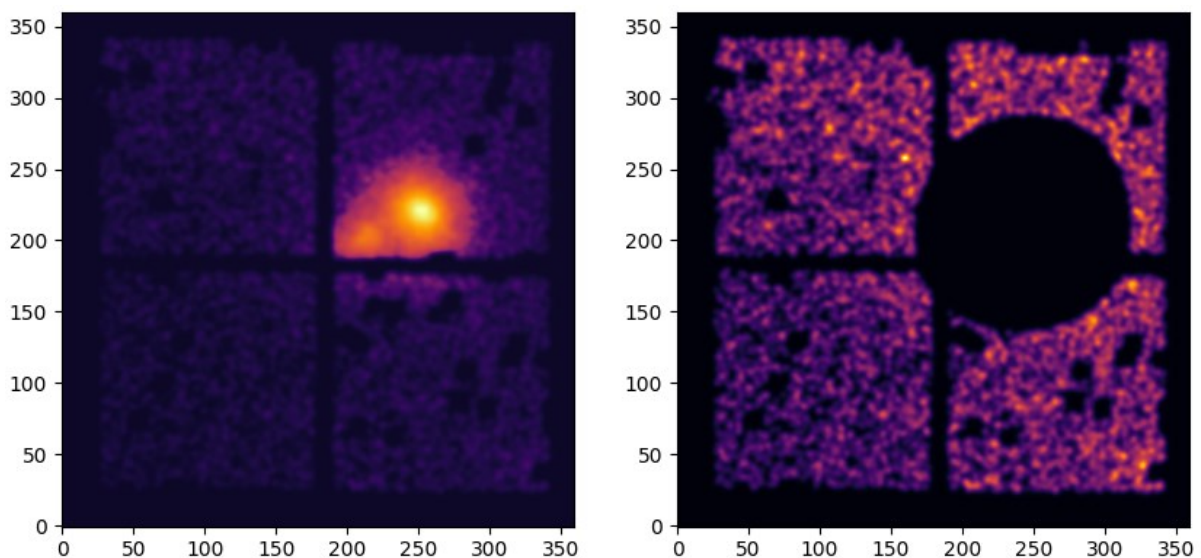


Рис. 3. Наблюдение со сфокусированным сигналом до и после процедуры очистки. Изображения сглажены гауссовым низкочастотным фильтром

Данный метод откалиброван и модернизирован для обработки наблюдений NuSTAR: использована специальная процедура вычисления порогов для детектирования структур различного масштаба, представлен итерационный алгоритм выбора очищаемой области для сохранения максимальной площади детектора. Это позволяет сохранить максимальную площадь области детектора, необходимую для анализа КРФ.

## Литература

1. *Wik D. R.* [et al.]. NuSTAR observations of the bullet cluster: constraints on inverse compton emission // *Astrophys. J.* 2014. V. 792(1): 48.
2. *Krivonos R. A.* [et al.]. NuSTAR measurement of the cosmic X-ray background in the 3–20 keV energy band // *MNRAS.* 2021. V. 502. P. 3966–3975.
3. *Gruber D. E.* [et al.]. The spectrum of diffuse cosmic hard X-rays measured with HEAO-1 // *Astrophys. J.* 1999. V. 520(1). P. 124–1.
4. *Vikhlinin A.* [et al.]. Another collision for the coma cluster // *Astrophys. J.* 1997. V. 474(1). P. L7–L10.

УДК 52-14 52-332.6

## Исследование структуры искривленных джетов активных галактик на масштабах парсек

*В. А. Макеев<sup>1,2</sup>, Ю. Ю. Ковалев<sup>3,2,1</sup>, А. Б. Пушкарев<sup>4,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>3</sup>Max-Planck-Institut für Radioastronomie

<sup>4</sup>Крымская астрофизическая обсерватория РАН

В данной работе представлены результаты поиска и анализа сильно искривленных джетов активных ядер галактик (АЯГ) на основе многочастотных общедоступных данных.

Десятилетия наблюдений джетов АЯГ с помощью радиоинтерферометрии со сверхдлинными базами (РСДБ) подтверждают, что некоторые из них демонстрируют изгибы [1–3] во всем диапазоне наблюдаемых масштабов — как в парсековых, так и в килопарсековых джетах [4, 5]. К этому явлению могут приводить различные физические механизмы, визуально усиливаемые проекционными эффектами. Некоторые из них представляют собой прецессию основания джета [6, 7], нестабильность Кельвина–Гельмгольца [8], взаимодействие с окружающей средой [9] или их комбинации. Важно отметить, что прецессия и нестабильности могут являться следствием фундаментальных явлений, происходящих в центральной машине АЯГ. Одним из наиболее ярких примеров является наличие системы из двух сверхмассивных черных дыр, в которой джет, соответствующий наиболее массивной из них, подвержен возмущениям, создаваемым обращающейся менее массивной черной дырой-компаньоном [10]. На данный момент, до запуска космического интерферометра LISA [11], прямой поиск таких систем невозможен и может быть выполнен только косвенными методами, в частности, по наблюдениям искривленных выбросов, систематизация которых как раз и проводится нами. Другим примером, потенциально приводящим к искривленным структурам в джете, может быть отклонение аккреционного диска относительно оси момента импульса одиночной черной дыры [12].

Для того чтобы исследовать морфологию струи, мы провели анализ результатов РСДБ-наблюдений, выполненных на разных частотах. Пример источника, сильное искривление выброса в котором видно лишь при использовании на нескольких частотах, представлен на рис. 1.

Для достижения целей нашего исследования мы использовали базу РСДБ-данных FITS-изображений *Astrogeo* ([http://astrogeo.org/vlbi\\_images](http://astrogeo.org/vlbi_images)), которая содержит более 100 тыс. распределений яркости примерно 17 тыс. компактных радиисточников и является результатом анализа РСДБ-обзоров. В общей сложности мы исследовали около 73 тыс. изображений примерно 11 тыс. АЯГ. В среднем каждый объект имеет восемь эпох и две частоты. Большинство изображений в базе данных при достигнутом уровне чувствительности не имели разрешенной протяженной структуры джета. Чтобы исключить такие источники из анализа, предварительно мы провели их фильтрацию путем моделирования гаусс-компонентой. В случае, если одной компонентой было достаточно для описания распределения яркости, структура источника считалась не протяженной. Процедура фильтрации сократила исходный набор данных на 52%. Оставшаяся часть содержит около 35 тыс. изображений 5,5 тыс. источников с разрешенной структурой джета.

Для классификации и физической интерпретации геометрии искривленных джетов мы провели моделирование их структуры с помощью простых геометрических моделей. Результаты моделирования показали, что абсолютное большинство источников наилучшим образом описывается с помощью линейной спирали, объединения двух линейных спиралей и логарифмической спирали. Последующее монте-карло-моделирование продемонстрировало, что продольная морфология джетов, описываемая логарифмической спиралью, не может быть применена в результате баллистического движения вещества при



прецессии основания выброса. Это является аргументом в пользу того, что видимая искривленная форма — следствие развития неустойчивости в джете.

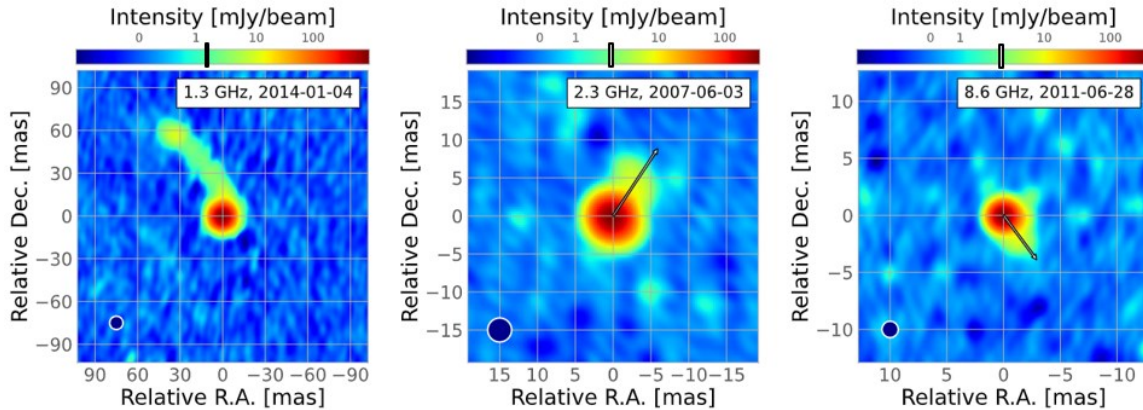


Рис. 1. Квазар J1327+2210: пример источника со значительно отличающимися направлениями джета, восстановленного на разных масштабах с помощью РСДБ-наблюдений на частотах 1,3, 2,3 и 8,6 ГГц. Это соответствует спиралевидной структуре всего джета. Стрелки (центральная и правая иллюстрация) указывают соответствующий позиционный угол джета на заданной частоте. Размер диаграммы направленности на уровне половинной мощности показан в нижних левых углах изображений. Вертикальными чертами на цветовых шкалах обозначены точки перехода из линейной шкалы (левее) в логарифмическую

### Литература

1. *Lister M. L.* [et al.]. 4C+12.50: A superluminal precessing jet in the recent merger system IRAS 13451+1232 // *Astrophys. J.* 2002. V. 584. P. 135–146.
2. *Stirling A. M.* [et al.]. Discovery of a precessing jet nozzle in BL Lacertae // *MNRAS.* 2003. V. 341. P. 405–422.
3. *Savolainen I.* [et al.]. An extremely curved relativistic jet in PKS 2136+141 // *Astrophys. J.* 2006. V. 647. P. 172–184.
4. *Homan D. C.* [et al.]. PKS 1510–089: A head-on view of a relativistic jet // *Astrophys. J.* 2002. V. 580. P. 742–748.
5. *Rawes J., Birkinshaw M., Worrall D. M.* Extreme jet bending on kiloparsec scales: the “doughnut” in NGC 6109 // *MNRAS.* 2018. V. 480. P. 3644–3654.
6. *Begelman M., Blandford R., Rees M.* Massive black hole binaries in active galactic nuclei // *Nature.* 1980. V. 287. P. 307–309.
7. *Lu J. F.* Accretion disk-driven jet precession in active galactic nuclei // *Astron. Astrophys.* 1990. V. 229. P. 424–426.
8. *Hardee P. E., Cooper M. A., Clarke D. A.* On jet response to a driving frequency and the jets in 3C 449 // *Astrophys. J.* 1994. V. 424. P. 126–137.
9. *Kosogorov N. A., Kovalev Y. Y., Perucho M., Kovalev Yu. A.* Parsec-scale properties of the peculiar gigahertz-peaked spectrum quasar 0858–279 // *MNRAS.* 2022. V. 510. P. 1480–1494.
10. *Begelman R. C.* [et al.]. Massive black hole binaries in active galactic nuclei // *Nature.* 1980. V. 287. P. 307–308.
11. *Bender P. L.* [et al., LISA study team]. LISA Pre-Phase A Report. 2nd ed. / MPQ 233. — Garching: Max Plank Inst. Quant. Opt., 1998.
12. *Liska M.* [et al.]. Formation of precessing jets by tilted black hole discs in 3D general relativistic MHD simulations // *Mon. Not. R. Astron. Soc. Lett.* 2018. V. 474(1). P.: L81–L85.

УДК: 524.7-1/-8

### Моделирование неравновесной ионизации межзвездной среды на ударных волнах

*А. Н. Нежин<sup>1,2</sup>, Е. М. Чуразов<sup>2,4</sup>, И. И. Хабибуллин<sup>3,2,4</sup>, Н. С. Лыскова<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт космических исследований РАН

<sup>3</sup>Университет Людвига и Максимилиана

<sup>4</sup>Институт астрофизики общества им. Макса Планка

Ударные волны различной природы могут возмущать типичную столкновительную плазму, которая является частью межзвездной и межгалактической среды, а главный индикатор такого возмущения — излучение, изучение которого дает ценную информацию о породившем его процессе. Однако такие исследования имеют ряд особенностей. В частности, плотность астрофизической плазмы может составлять

несколько частиц на кубический метр, что приводит к временным масштабам взаимодействия в миллионы лет и создает большие задержки между самим событием и его очевидными последствиями.

Так, например, рентгеновское излучение молодых остатков сверхновых возникает из-за высоко-температурной плазмы (прежде всего межзвездного газа), нагретой при прохождении быстро движущегося фронта ударной волны. При этом ионные фракции, образовавшиеся на ударных волнах, часто сильно отличаются от возможных равновесных значений, которые могли бы быть при текущей температуре электронов в плазме. Также необходимо учитывать скорость уравнивания температур электронов и ионов после фронта, неоднородности плотности в окружающей среде и т. д.

Таким образом, общая задача расчета эволюции плазмы за ударной волной в зависимости от времени, включая спектр излучения плазмы в процессе эволюции, требует большого набора атомных данных и умеренно сложного спектрального кода [5]. Поэтому в данной работе обсуждается разработка численных методов, которые направлены на расчет спектров рентгеновского излучения на ударных волнах в скоплениях галактик и вспышках сверхновых. Основной задачей такого моделирования является определение истории процессов неравновесной ионизации, в частности зависимости концентрации ионных компонент от времени. При этом реализуемая задача отличается особой универсальностью, так как главные предположения лежат в области атомарных процессов, но не космологических, что позволит использовать разработанный подход для решения многих других астрофизических проблем.

В первой части работы обсуждается теория моделируемых процессов; в частности, описывается форма уравнения баланса после фронта ударной волны. Также рассматриваются вопросы ударного скачка параметров компонент астрофизической плазмы [2, 6] с металлами, соответствующими приближению малой примеси, и постударная эволюция температур, основанная на кулоновских соударениях [1, 3].

Вторая часть работы содержит рассмотрение численных методов. Сравниваются подходы, основанные как на численном интегрировании, так и на методе собственных векторов — собственных значений [4], а также обсуждается целесообразность применения тех или иных вариантов решения задачи в зависимости от ее постановки.

В третьей части представлены результаты применения построенной модели.

### Литература

1. Коган В. И. О скорости выравнивания температур заряженных частиц в плазме // Физика плазмы и проблемы управляемых термоядерных реакций. Т. 1. — М.: АН СССР, 1958. С. 130–137.
2. Ландау Л. Д., Lifshitz E. M. Теоретическая физика. В 10 томах. Том 6: Гидродинамика. — М., Физматлит, 2001.
3. Huba J. NRL: Plasma formulary. — Washington: Naval Research Laboratory, 2004.
4. Hughes J. P., Helfand D. J. Self-consistent models for the X-ray emission from supernova remnants: an application to Kepler's remnant // *Astrophys. J.* 1985. V. 291. P. 544–560.
5. Smith R. K., John P. H. Ionization equilibrium timescales in collisional plasmas // *Astrophys. J.* 2010. V. 718. P. 971–982.
6. Vink J. [et al.]. On the electron-ion temperature ratio established by collisionless shocks // *Astron. Astrophys.* 2015. V. 579: A13.

УДК 524.7

## Оценка параметров модели нагрева излучающей плазмы в галактике M87

*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]. Наблюдения в высоком разрешении показывают выраженную двух- или трехгорбую структуру интенсивности излучения и спектрального индекса для джета в галактике M87 [2–4]. В работе мы исследуем, какие распределения излучающей плазмы в джете позволяют получить такие профили интенсивности, и оцениваем параметры этих распределений, сопоставляя наблюдательные данные и результаты моделирования.

В работе моделируется синхротронное излучение с самопоглощением для цилиндрического релятивистского струйного выброса. Для этого мы рассматриваем модель струйного выброса, предложенную в работе [5]; для построения профилей интенсивности мы решаем уравнение переноса излучения [6].

В рамках рассматриваемой модели в струйном выбросе имеется область, называемая центральным «кором» (central core), характеризующаяся большими значениями магнитного поля и концентрации

электронов. Сопоставление наблюдаемых и промоделированных профилей интенсивности позволило верифицировать предположение, что в моделях с центральным кором [5, 7] реалистичные как качественно, так и количественно профили интенсивности с несколькими пиками возникают при ограничении излучения центрального кора. В работе мы задаем это ограничение, предполагая, что нетепловые электроны находятся преимущественно в граничных областях джета. Такая модель нагрева имеет два параметра: процент излучающей плазмы в центральном коре и координата модельного разделения струи на полностью излучающую оболочку и слабо излучающий центральный кор. Помимо этих параметров, необходимо определить сечение джета, наиболее соответствующее наблюдательным данным, т. е. начальную замагниченность джета, безразмерную ширину сечения, угол наблюдения. Фитирование профиля интенсивности также дает оценку полного магнитного потока в джете и радиуса светового цилиндра.

Для согласованной оценки всех параметров модели и поиска возможного вырождения по наборам параметров были разработаны два разных подхода. Первый из разработанных нами методов представляет собой детерминированный алгоритм, который для заданного сечения джета при заданном начальном приближении параметров нагрева итеративно обновляет параметры модели так, чтобы с заданной точностью получить соответствие следующих наблюдаемых и промоделированных характеристик: значений интенсивности в каждом из пиков и удаленности пиков друг от друга. Воспроизведение этих особенностей — достоинство этого подхода. Его ограничения состоят в высоких вычислительных затратах и в сложной связи между теоретическими идеальным и свернутым с подходящей диаграммой направленности профилями интенсивности. Для преодоления этих трудностей была разработана процедура последовательного усложнения алгоритма, состоящая в том, что изначально алгоритм отыскивает параметры при заданных невысокой точности и малой диаграмме направленности, а далее точность последовательно повышается и диаграмма направленности увеличивается, при этом в качестве нового начального приближения алгоритм использует результаты своей менее точной работы. Такая процедура позволяет исключить модели, в которых невозможно получить профили с подходящими свернутыми пиками. Второй подход призван как снизить вычислительные затраты, так и обойти потерю данных об экстремумах интенсивности в процессе свертки. Этот подход использует сэмплирование сечений джета и параметров нагрева, и метрикой близости теоретического и наблюдаемого профилей является среднеквадратичная ошибка. Недостаток этого метода состоит в отказе от непосредственного отслеживания структуры джета.

Преимуществом каждого из разработанных подходов является их универсальность, которая позволит в дальнейшем применять их не только к галактике M87, но и к любым интересующим профилям интенсивности, что, в свою очередь, позволит исследовать параметры релятивистских джетов статистически и сделать более общие выводы о распространении и природе нагрева.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания № 0714-2021-0003.

## Литература

1. *Blandford R., Meier D., Readhead A.* Relativistic Jets from Active Galactic Nuclei // *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* 2019. V. 57. P. 467–509.
2. *Mertens F.* [et al.]. Kinematics of the jet in M87 on scales of 100–1000 Schwarzschild radii // *Astron. Astrophys.* 2016. V. 595: A54.
3. *Hada K.* The Structure and Propagation of the Misaligned Jet M 87 // *Galaxies.* 2017. V. 5(1): 2.
4. *Kim J.-Y.* [et al.]. The limb-brightened jet of M 87 down to the 7 Schwarzschild radii scale // *Astron. Astrophys.* 2018. V. 616: A188.
5. *Beskin V.* [et al.]. On the internal structure of relativistic jets collimated by ambient gas pressure // *MNRAS.* 2017. V. 472. P. 3971–3978.
6. *Rybicki G. B., Lightman A. P.* Radiative Processes in Astrophysics. — New York: Wiley, 1986.
7. *Lyubarsky Y.* Asymptotic Structure of Poynting-Dominated Jets // *Astrophys. J.* 2009. V. 698. P. 1570–1589.

## Оценка напряженности магнитного поля вблизи центральной черной дыры в квазаре 3C 273

В. Р. Тихомирова<sup>1</sup>, М. М. Лисаков<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский педагогический государственный университет (Институт физики, технологии и информационных систем)

<sup>2</sup>Астрономический центр Физического института им. П. Н. Лебедева РАН

Релятивистские джеты, испускаемые квазарами, являются показателем активности черной дыры, влияют на звездообразование в родительской галактике и связаны с рождением нейтрино высоких энергий. В процессах запуска, коллимации и ускорения джетов важную роль играет магнитное поле. Результаты оценки напряженности магнитного поля в окрестности черной дыры могут быть использованы для сравнения с предсказаниями численного моделирования аккреции, которые вместе с теоретическими предсказаниями могут говорить о влиянии магнитных полей на запуск сильных джетов. Мы хотим проверить это и сравнить магнитное поле мощного квазара 3C 273 (рис. 1а) и не такой мощной радиогалактики М87. На основе полученных данных в том числе можно выяснить, является ли ядром изучаемого квазара черная дыра, а не что-то иное: полученные значения сравниваются с теоретическим пределом напряженности магнитного поля в аккреционном диске для черной дыры (10000 Гс).

В данном проекте получены параметры магнитного поля, такие как его напряженность  $B$ , в окрестностях черной дыры путем исследования частотно-зависимого сдвига оптически толстого начала джета (ядра) [1]. Для этого были взяты одновременные радиоинтерферометрические наблюдения квазара 3C 273 на трех частотах — 15, 43 и 86 ГГц, проведенные с помощью антенной решетки VLBA в сентябре 2020 г. Исследования параметров джета и черной дыры этого квазара на основе одновременных наблюдений на таких высоких частотах раньше не проводились.

Значение сдвига ядра было найдено с помощью моделирования структуры джета на разных частотах с использованием 2D гаусс-компонент и сопоставления оптически тонких областей на разных частотах для пар 15–43 ГГц и 43–86 ГГц. Также по формуле  $\Delta L = \Delta R W / 2P$  были рассчитаны ошибки измерения сдвига ядра (рис. 1б), зависящие от диаметра оптически тонких компонент джета ( $W$ ), и соотношения шума в области компоненты ( $\Delta R$ ) к ее интенсивности ( $P$ ) [2].

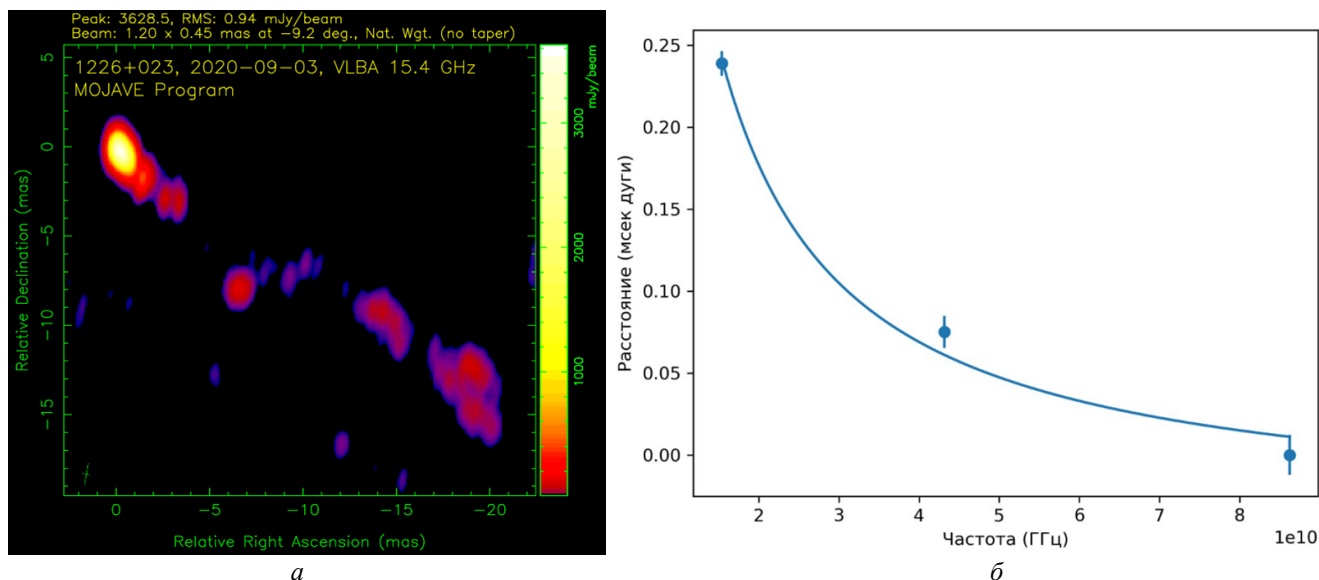


Рис. 1. Квазар 3C 273 (источник: MOJAVE) (а); частотно-зависимый сдвиг видимого ядра (б)

Для конического джета, в котором основным механизмом поглощения является синхротронное самопоглощение, положение видимого начала джета в зависимости от частоты наблюдения описывается законом  $r = a \cdot \nu^{-1} + b$  [3]. Для частоты 86 ГГц расстоянием до черной дыры является коэффициент  $b$ , следовательно,  $r = 0,04$  мс дуги.

По формуле  $B_1 = 0,014 \left[ \frac{\Omega_{rv}^3 (1+z)^3 \ln(10^3)}{\delta^2 \phi \sin^2 \theta} \right]^{1/4}$ , где  $\Omega$  — сдвиг ядра на единицу частоты,  $z$  — красное

смещение,  $\delta = 1/\Gamma(1 - \beta \cos \theta)$  — релятивистский доплеровский фактор,  $\phi$  — угол раскрытия джета,  $\theta$  — угол между направлением джета и лучом зрения, можно определить значение напряженности магнитного поля на расстоянии 1 пк от истоков джета. Для тороидальной компоненты магнитного поля напряженность спадает с расстоянием вдоль струи по закону  $B = B_1 \cdot r^{-1}$ , следовательно, можно вычислить  $B$  в любой точке джета. Путем аппроксимации можно также определить значения напряженности магнитного поля в еще нескольких точках джета, например в видимых ядрах на исследуемых частотах. В табл. 1 показано сравнение полученных нами данных с данными других исследований.

Значение напряженности магнитного поля в окрестности черной дыры массой около  $10^9 M_\odot$  на расстоянии примерно  $5R_g$  для квазара 3C 273 по расчетам равно  $B_{3C\,273} \sim 1300$  Гс. Для сравнения приведем значения напряженности магнитного поля вблизи черной дыры галактики M87:  $B_{M87} \sim 1 - 30$  Гс [6].

Т а б л и ц а 1. Сравнение полученных значений напряженности магнитного поля  $B$  со значениями в литературе

	Наша команда	Данные других команд
В ядре на 15 ГГц	0,08 Гс	0,07 Гс
В ядре на 43 ГГц	0,2 Гс	0,2 Гс [4]
В ядре на 86 ГГц	0,6 Гс	2 Гс [5]

Полученное значение  $B$  согласуется с теоретическими предсказаниями для аккреционного диска вокруг черной дыры. Методы, разработанные в этом проекте, делают доступными исследования большего количества квазаров с меньшими материальными и временными затратами без потери точности исследуемых значений, а также делают возможными сравнение магнитных полей в квазарах с мощными джетами и в радиогалактиках (например, M87) со слабыми. По-видимому, величина  $B$  сильно влияет на мощность джета. В будущем мы планируем рассмотреть этот вопрос более подробно.

### Литература

1. *Pushkarev A. B.* [et al.]. MOJAVE: Monitoring of Jets in Active galactic nuclei with VLBA Experiments. IX. Nuclear opacity // *Astron. Astrophys.* 2012. V. 545: A113.
2. *Lisakov M. M.* [et al.]. A connection between  $\gamma$ -ray and parsec-scale radio flares in the blazar 3C 273 // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 2017. V. 468. P. 4478–4493.
3. *Lobanov A. P.* Ultracompact jets in active galactic nuclei // *Astron. Astrophys.* 1998. V. 330(1). P. 79–89.
4. *Sokolovsky K.* Multi-frequency study of relativistic jets in active galactic nuclei: PhD thesis. Universitat zu Köln, 2011.
5. *Savolainen T.* [et al.]. Magnetic field structure in the parsec scale jet of 3C 273 from multifrequency VLBA observations // *ASP Conference Series.* 2008. V. 386 [Extragalactic jets: theory and observation from radio to gamma ray]. P. 451–458.
6. *Savolainen T.* [et al., The Event Horizon Telescope Collaboration]. First M87 Event Horizon Telescope Results. VIII. Magnetic Field Structure near The Event Horizon // *Astrophys. J. Lett.* 2021. V. 910: L13.

УДК 524.882

### Силуэты кротовых нор, проходимых для излучения

*М. А. Бугаев<sup>1</sup>, И. Д. Новиков<sup>2,3,4</sup>, С. В. Репин<sup>2</sup>, И. Д. Новиков мл.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Астрокосмический центр

<sup>3</sup>The Niels Bohr International Academy, The Niels Bohr Institute

<sup>4</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Рассматривается задача о прохождении света сквозь горловину кротовой норы нулевой массы и возможность наблюдения объектов из другого асимптотически плоского пространства сквозь горловину

кротовой норы. Отмечен тот факт, что изображение плоского ламбертовского экрана имеет сложное распределение яркости для наблюдателя, находящегося с ним по разные стороны горловины. Построены изображения двух таких экранов, видимых внутри силуэта безмассовой кротовой норы, и распределение интенсивности излучения в их изображениях.

Для построения теней (силуэтов) необходимо численным интегрированием построить большое количество нулевых геодезических в поле кротовой норы. Уравнения движения кванта в метрике Эллиса–Бронникова–Морриса–Торна [2, 3] получаются из уравнения Гамильтона–Якоби после разделения переменных и имеют вид:

$$\frac{dt}{d\sigma} = \frac{1}{r^2}, \quad (1)$$

$$\frac{dr}{d\sigma} = r_1, \quad (2)$$

$$\frac{dr_1}{d\sigma} = 2(\eta + \xi^2)r^3 - (1 + \eta + \xi^2)r, \quad (3)$$

$$\frac{d\theta}{d\sigma} = \theta_1, \quad (4)$$

$$\frac{d\theta_1}{d\sigma} = \frac{\xi^2 \cos \theta}{\sin^3 \theta}, \quad (5)$$

$$\frac{d\varphi}{d\sigma} = \frac{\xi}{\sin^2 \theta}, \quad (6)$$

где  $t$ ,  $1/r$ ,  $\theta$ ,  $\varphi$  — координаты Бойера–Линдквиста,  $\xi$  и  $\eta$  — константы Чандрасекара,  $r_1$  и  $\theta_1$  — вспомогательные переменные, которые нужны для упрощения численного интегрирования [4].

Постановка задачи схематично изображена на рис. 1. По ту сторону горловины кротовой норы (в пространстве-2) от наблюдателя (в пространстве-1) находится ламбертовский экран, который может быть расположен в пространстве-2 как «за» выходом из кротовой норы, так и «перед» ним. Рассматривается, как экран будет виден с точки зрения наблюдателя.

Лучи, проходящие рядом с горловиной кротовой норы, могут сильно искривляться в зависимости от прицельного параметра. В нашей задаче рассматриваются лучи, проходящие сквозь кротовую нору, поведение которых не менее сложно (см. рис. 2). Некоторые лучи могут совершать несколько оборотов вокруг горловины, что приводит к образованию фотонных колец. Данный эффект отсутствует в классической механике. Сильный разброс лучей при некоторых значениях прицельного параметра приводит к неоднородному распределению яркости на изображении экрана.

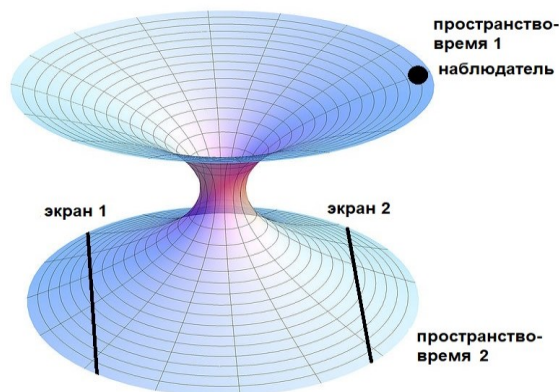


Рис. 1. Схема расположения наблюдателя в пространстве-1 и протяженных ламбертовских экранов в пространстве-2

На рис. 3 показана форма силуэта кротовой норы Эллиса–Бронникова–Морриса–Торна на фоне экрана 1, а также в условных цветах построено распределение интенсивности излучения изображения экрана. На рис. 4 приведены аналогичные изображения, но для экрана 2.

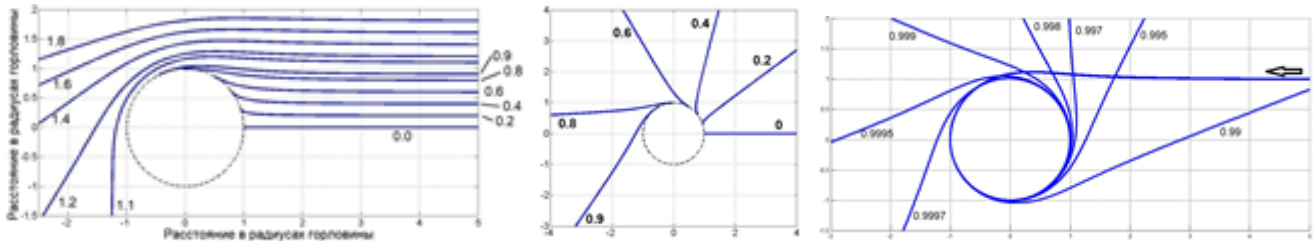


Рис. 2. Нулевые геодезические: снаружи горловины (слева), продолжение нулевых геодезических в пространстве-2 (по центру), сильно искривляющиеся вблизи горловины траектории нулевых геодезических в пространстве-2. Рядом с траекториями указаны прицельные параметры

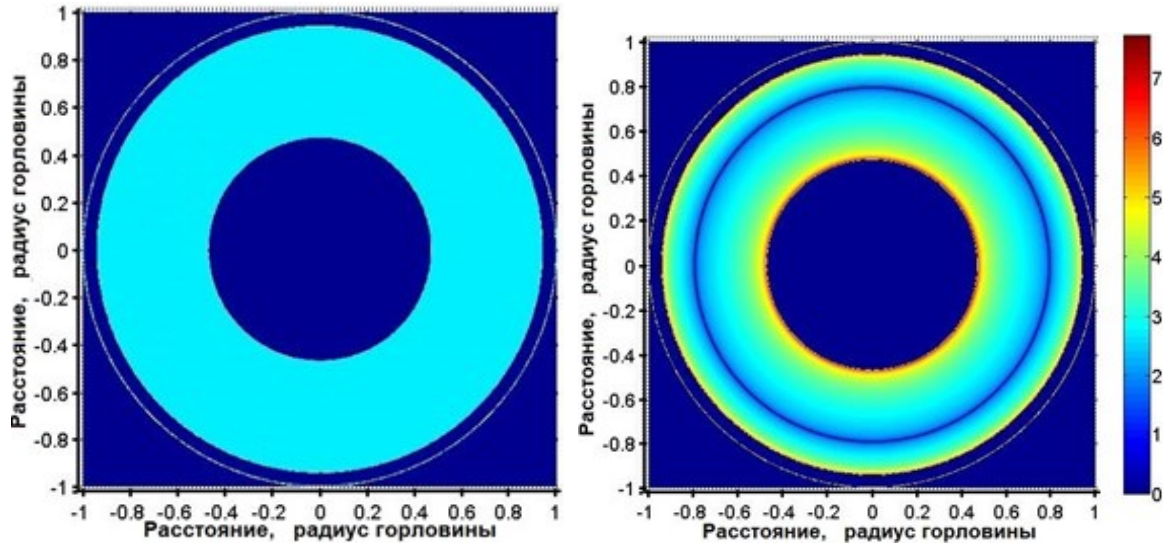


Рис. 3. Изображение плоского ламбертовского экрана-1, которое наблюдатель видит сквозь горловину кротовой норы. Слева показан силуэт этого экрана; справа — распределение интенсивности излучения изображения в логарифмической шкале

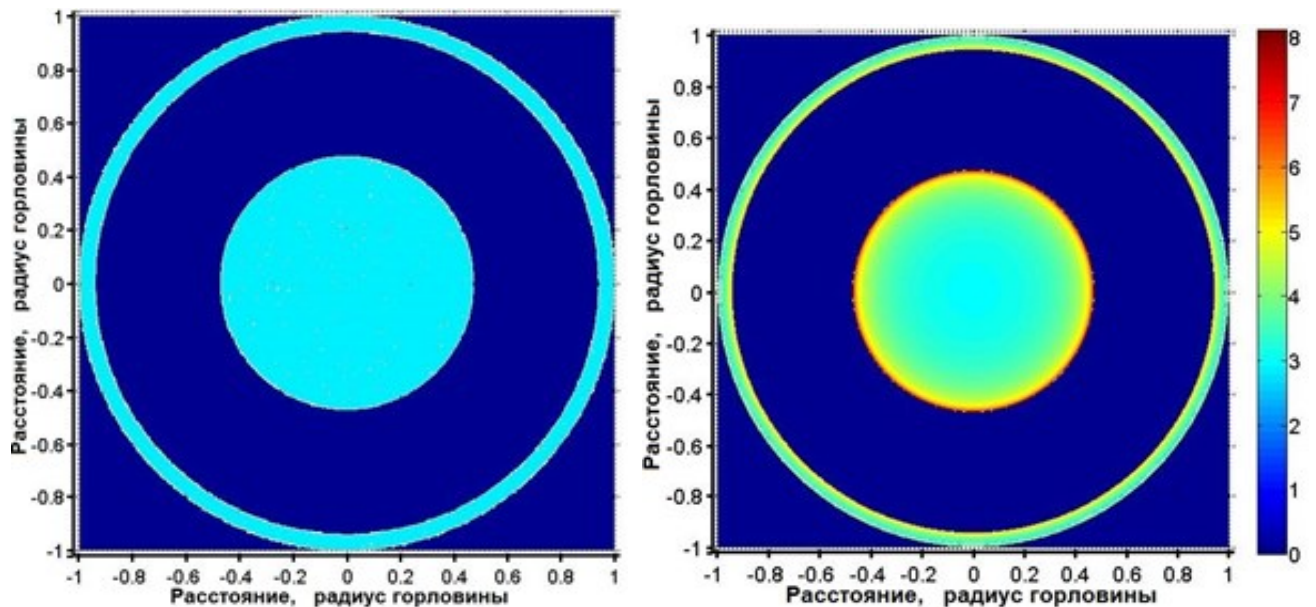


Рис. 4. Изображение плоского ламбертовского экрана-2, которое наблюдатель видит сквозь горловину кротовой норы. Слева показан силуэт этого экрана, а справа — распределение интенсивности излучения изображения в логарифмической шкале

Высказывались предположения, что в центрах некоторых галактик могут находиться не черные дыры, а кротовые норы [5]. В рассмотренной модели силуэта проходимой кротовой норы существуют характерные детали изображения, которые можно использовать для идентификации этих объектов в интерферометрических наблюдениях.

## 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. С. 971–979.
2. Morris M. S., Thorne K. S. Wormholes in spacetime and their use for interstellar travel: A tool for teaching general relativity // *Am. J. Phys.* 1988. V. 56. P. 395–412.
3. Morris M. S., Thorne K. S., Yurtsever U. Wormholes, time machines, and the weak energy condition // *Phys. Rev. Lett.* 1988. V. 61. P. 1446–1449.
4. Zakharov A. F., Repin S. V. The spectrum of an accretion disk around a rotation black hole // *Astron. Rep.* 1999. V. 43(11). P. 705–717.
5. Kardashev N. S., Novikov I. D., Repin S. V. Wormholes with entrances close to each other // *Physics–Uspekhi*. 2020. V. 63(6). P. 617–621.

УДК 533.9.01

### Образование крупномасштабных структур в устойчиво стратифицированной затухающей турбулентности

О. П. Воробьев<sup>1</sup>, А. С. Петросян<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт космических исследований РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

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 следующем виде:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{\nabla P}{\rho_0} - \alpha T \mathbf{g} + 2\mathbf{v} \times \boldsymbol{\Omega} + \nu \nabla^2 \mathbf{v}, \quad (2)$$

$$\frac{dT}{dt} + \beta v_r = \kappa \nabla^2 T, \quad (3)$$

где  $d/dt \equiv \partial/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla$ . Приняты следующие обозначения:  $\mathbf{V}$  — это скорость жидкости,  $\rho_0$  — 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,  $\alpha$  — коэффициент теплового расширения и  $\beta$  — 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 Чебышёва. 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  $256 \times 128 \times 30$  по широте, долготе и радиусу соответственно. Обсуждаются результаты моделирования трехмерной затухающей турбулентности, исследовано влияние вращения и стратификации на устойчиво стратифицированные турбулентные течения. Полученные спектры свидетельствуют о переносе энергии от мелких вихрей к крупномасштабным структурам. Хотя обратный каскад кинетической энергии в сферических системах не наблюдался, существуют свидетельства обратного каскада в трехмерных декартовых моделях [3].

Работа поддержана фондом развития теоретической физики и математики «Базис».



## Литература

1. *Miesch M. S.* Numerical modeling of the solar tachocline. I. Freely evolving stratified turbulence in a thin rotating spherical shell // *Astroph. J.* 2001. V. 562(2). P. 1058–1075.
2. *Clune T. C.* [et al.]. Computational aspects of a code to study rotating turbulent convection in spherical shells // *Parallel Comput.* 1999. V. 25(4). P. 361–380.
3. *Marino R.* [et al.]. Inverse cascades in rotating stratified turbulence: fast growth of large scales // *Europhys. Lett.* 2013. V. 102(4): 44006.

УДК 52-653, 52-656, 52-14, 52-332.2

### Обнаружение субизображений квазара, сформированных плазменной линзой межзвездной среды Галактики

Т. А. Корюкова<sup>1</sup>, А. Б. Пушкарев<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup>Астрокосмический центр Физического института им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>2</sup>Крымская астрофизическая обсерватория РАН

Анализируя рассеивающие свойства межзвездной среды Галактики на основе наблюдений около 9 000 выбросов активных ядер галактик в диапазоне частот от 1,4 до 86 ГГц [1] методом радиоинтерферометрии со сверхдлинными базами (РСДБ), мы обнаружили ряд источников, которые демонстрируют анизотропное рассеяние с преобладанием рефракции. Одним из таких объектов является квазар 2005+403, результаты исследования свойств которого мы приводим в данной работе.

Квazarы, наблюдающиеся на гигагерцевых частотах с помощью РСДБ, обычно показывают одно-стороннюю структуру типа ядро–выброс на миллисекундных угловых масштабах. Самая яркая и, как правило, наиболее компактная морфологическая деталь, находящаяся в видимом начале выброса, называется РСДБ-ядром. На относительно высокой частоте 15,4 ГГц (рис. 1, слева) изображение источника не искажено эффектами рассеяния и имеет типичную морфологию квазара с внутренним джетом, распространяющимся в направлении позиционного угла  $\approx 96^\circ$ . Однако на более низкой частоте, 5,0 ГГц (рис. 1, по центру), мы уже обнаруживаем наблюдательные признаки рассеяния, регистрируя вторичное изображение РСДБ-ядра. При этом все еще наблюдается излучение джета, направленного вдоль позиционного угла  $\approx 124^\circ$  на масштабах порядка 10 мс дуги от ядра.

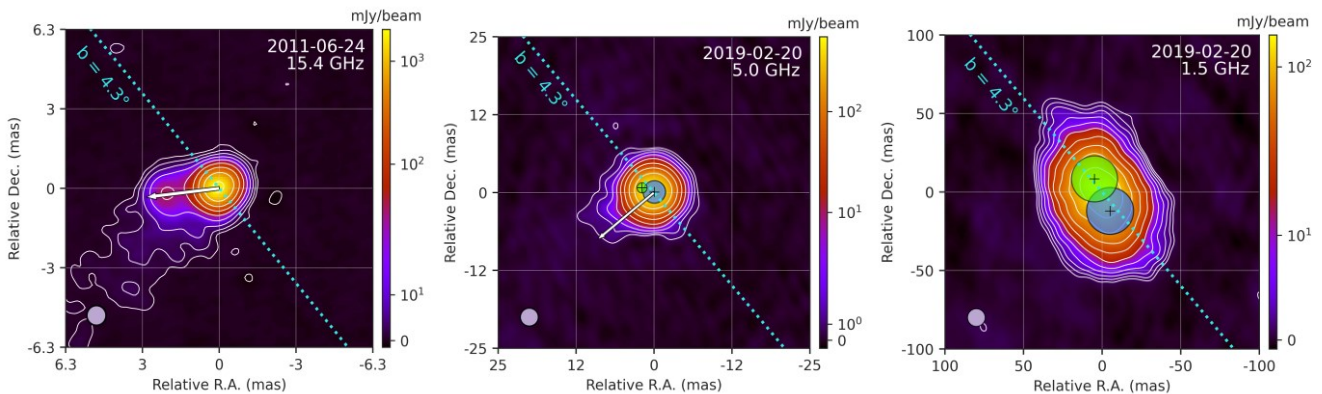


Рис. 1. VLBA-изображения квазара 2005+403, свернутые с круговой диаграммой направленности. Для визуализации эффекта рассеяния размер каждой карты подобран в одинаковом соотношении к размеру соответствующей диаграммы направленности, показанной по уровню половинной мощности в левом нижнем углу карты. Слева: карта распределения яркости источника на частоте наблюдения 15,4 ГГц. Стрелка показывает направление выброса на данной частоте. В центре: карта на частоте 5,0 ГГц. Круги во внутренней части источника представляют собой гаусс-компоненты ядра (синий) и его субизображения (зеленый). Справа: карта на частоте 1,5 ГГц. Вторичное изображение (зеленый круг) смещено примерно вдоль линии равной галактической широты  $b=4,3^\circ$  (голубая пунктирная линия). Контурсы равной интенсивности проведены с коэффициентом 2, начиная с четырехкратного уровня шума карты

На самой низкой из доступных частот наблюдения (1,5 ГГц) восстановленная морфология квазара 2005+403 является крайне нетипичной. При формировании наблюдаемого распределения яркости

источника на 1,5 ГГц уже доминируют эффекты рассеяния, создающие дополнительные яркие излучающие области, протяженные в направлении, близком к линии равной галактической широты (рис. 1, голубая пунктирная линия). Морфологические особенности такого рода представляют собой вторичные или субизображения фонового объекта. Они могут формироваться эффектом линзирования, когда рассеивающий экран пересекает луч зрения на компактный фоновый источник радиоизлучения [2]. При этом могут создаваться каустические поверхности на интегральной кривой блеска источника, а его наблюдательная структура может преобразовываться в иерархию нескольких субизображений, смещенных в направлении относительного движения рассеивающего экрана и наблюдаемого источника. Вторичное изображение РСДБ-ядра, обнаруженное на частотах 1,5 и 5,0 ГГц, смещено вдоль линии равной галактической широты ( $b = 4,3^\circ$ ) в направлении позиционного угла  $\approx 40^\circ$ , что свидетельствует об орбитальном движении плазменной линзы в Галактике. При этом преломляющая сила линзы достаточно высока, чтобы отделить вторичное изображение ядра от основного. Заметим, что направления распространения джета и линии, вдоль которой происходит формирование вторичных изображений, примерно ортогональны.

Мы провели моделирование наблюдаемого распределения яркости источника на частотах 1,5, 1,8, 2,3 и 5,0 ГГц круговыми гаусс-компонентами. Модели содержат три компонента на частотах 2,3 и 5,0 ГГц и две компонента на частотах 1,5 и 1,8 ГГц. Расстояние между ядром и его вторичным изображением, индуцированным рефракционным рассеянием и смещенным вдоль линии равной галактической широты, зависит от частоты с показателем степени  $-1,9 \pm 0,1$ . Масштабирование расстояния между компонентами, близкое к  $\nu^{-2}$ , является еще одним прямым наблюдательным свидетельством эффекта рассеяния на плазменной линзе с профилем плотности свободных электронов, близким к гауссовому.

Распределение спектрального индекса  $\alpha$ , определяемого через соотношение  $S \sim \nu^\alpha$ , где  $S$  — плотность потока излучения на частоте наблюдения  $\nu$ , построенное с использованием данных на 1,5 и 5,0 ГГц, показывает экстремальные значения. Это обусловлено все большим преобладанием рассеяния с уменьшением частоты  $\nu$ . Наблюдаемое распределение яркости источника искажается как дифракционными эффектами рассеяния радиоизлучения, приводящими к наблюдаемому увеличению углового размера источника, так и рефракционными эффектами, которые характеризуются анизотропностью рассеяния и формированием вторичных изображений РСДБ-ядра объекта, что и обнаружено нами в случае квазара 2005+403.

### Литература

1. *Koryukova T. A., Pushkarev A. B., Plavin A. V., Kovalev Y. Y.* Tracing Milky Way scattering by compact extragalactic radio sources // MNRAS. 2022. V. 515(2). P. 1736–1750.
2. *Clegg A. W., Fey A. L., Lazio T. J. W.* The Gaussian Plasma Lens in Astrophysics: Refraction // Astrophys. J. 1998. V. 496(1). P. 253–266.

УДК 533.9.01

## Волновые процессы в частично ионизованной астрофизической и космической плазме

*Ю. Т. Клименко<sup>1,2</sup>, С. И. Сафонов<sup>2</sup>, М. А. Федотова<sup>2</sup>, А. С. Петросян<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт космических исследований РАН

Многие процессы в космической физике и астрофизике описываются плазмой с газовой добавкой. Примерами такой плазмы являются ионосферно-термосферная система Земли и планет, солнечная хромосфера, межзвездный газ. Фактически такая плазма может считаться частично ионизованной, в которой не происходят элементарные процессы, например, ионизации и рекомбинации. В работе мы используем модель частично ионизованной плазмы для описания крупномасштабных течений в космической и астрофизической плазме.

В частично ионизованной плазме важную роль играют взаимодействия ионизованной компоненты и нейтральной компоненты. Для описания крупномасштабных течений во вращающейся частично ионизованной плазме используются уравнения многожидкостной магнитной гидродинамики во вращающейся системе отсчета в магнитном и электрическом поле при наличии столкновений ионизованной компоненты плазмы с нейтральной [1].

Система отсчета выбрана таким образом, что вектор угловой скорости вращения направлен вдоль вертикальной оси:  $\Omega = (0, 0, f_V/2)$ . При этом, если  $f_V = f \sin \varphi = \text{const}$ , где  $f$  — параметр Кориолиса, а

$\varphi$  — широта исследуемой области, то такое приближение называется приближением стандартной  $f$ -плоскости. Если же  $f_V = f \sin \varphi \approx f \sin \varphi_0 + f(\varphi - \varphi_0) \cos \varphi = f_0 + \beta y$ , где  $y = r(\varphi - \varphi_0)$ , то такое приближение называется приближением  $\beta$ -плоскости для силы Кориолиса [2].

Была развита теория для описания трехмерной частично ионизованной вращающейся космической плазмы в трехжидкостном и двухжидкостном описаниях в приближении стандартной  $f$ -плоскости и приближении  $\beta$ -плоскости для силы Кориолиса. Получены общие дисперсионные уравнения для волн в частично ионизованной вращающейся плазме в линейном приближении в каждом из случаев.

При анализе дисперсионного уравнения, полученного в трехжидкостной модели в случае стандартной  $f$ -плоскости, были получены дисперсионные соотношения для линейных волн вида

$$\omega_{1,2} = \pm \frac{fk_z}{k}, \quad (1)$$

$$\omega_{3,4} = \pm \sqrt{\left(\frac{fk_z}{k} + \frac{e}{m_i c} B \cos \theta\right)^2 + v_{in}^2}, \quad (2)$$

где  $f$  — параметр Кориолиса,  $B$  — магнитное поле,  $\theta$  — угол между волновым вектором  $\mathbf{k}$  и магнитным полем,  $v_{in}$  — частота столкновений ионов с нейтралами. В случае анизотропных ионно-инерционных волн (1) восстанавливающей силой является сила Кориолиса. На динамику анизотропных магнитных ионно-инерционных волн (2) оказывает эффект конкуренция силы Лоренца и силы Кориолиса. В случае вертикальных течений на  $f$ -плоскости было также показано, что линейные волны в частично ионизованной вращающейся плазме переходят в ионно-инерционные волны и магнитные ионно-инерционные волны.

В трехжидкостном описании также была выведена и линеаризована система уравнений магнитной гидродинамики в приближении  $\beta$ -плоскости для силы Кориолиса. Полученная система достаточно сложна для анализа дисперсионных соотношений линейных волн в частично ионизованной вращающейся плазме. Тем не менее система существенно упрощается в двумерном приближении. При  $k_z = 0$

дисперсионные соотношения принимают вид:  $\omega_1 = 0$ ,  $\omega_2 = \frac{3\beta k_x}{2(k_x^2 + k_y^2)}$ .

Переход от многожидкостного описания к двухжидкостной модели позволил улучшить описание электромагнитных эффектов при наличии вращения. В двухжидкостном описании в приближении стандартной  $f$ -плоскости было получено дисперсионное соотношение для волн в линейном приближении в двумерном случае. В этом случае частота волны зависит квадратично от модуля волнового вектора и линейно от степени ионизации частично ионизованной плазмы. Были рассмотрены два предельных случая общего дисперсионного уравнения для линейных волн в частично ионизованной вращающейся плазме в двухжидкостном описании в приближении  $f$ -плоскости: высокочастотный (рис. 1) и низкочастотный предел (рис. 2).

В двухжидкостном приближении также получена и линеаризована система уравнений магнитной гидродинамики в приближении  $\beta$ -плоскости для силы Кориолиса. В этом случае полученное дисперсионное уравнение не имеет аналитического решения. Обсуждаются возможности численного решения задачи.

Работа поддержана фондом развития теоретической физики и математики «Базис».

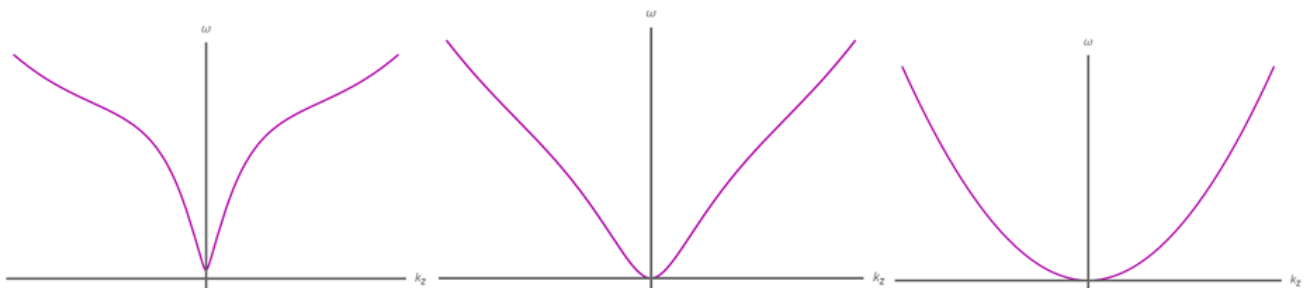


Рис. 1. Дисперсионные кривые  $\omega(k_z)$  в пределе высоких частот при  $k_{\perp} \ll k_z$ , при  $k_{\perp} \approx k_z$  и при  $k_{\perp} = 0$

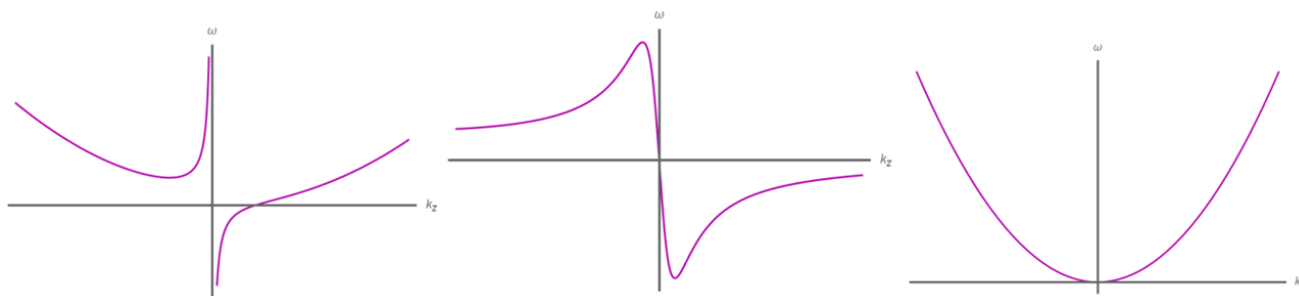


Рис. 2. Дисперсионные кривые  $\omega(k_z)$  в пределе низких частот при  $k_{\perp} \ll k_z$ , при  $k_{\perp} \approx k_z$  и при  $k_{\perp} = 0$

### Литература

1. Гершман Б. Н. Динамика ионосферной плазмы. — М.: Наука, 1974.
2. Vallis G. K. Atmospheric and oceanic fluid dynamics. — Cambridge: Cambridge University Press, 2017.

УДК 52-853

## К вопросу об образовании пылевых облаков в ионосфере Марса

Ю. С. Резниченко<sup>1</sup>, А. Ю. Дубинский<sup>2</sup>, С. И. Попель<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт комических исследований РАН

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Представлена теоретическая модель, описывающая самосогласованным образом плазменно-пылевые структуры марсианской ионосферы. Данная модель учитывает некоторые особенности, важные для ионосферы Марса, но не включаемые в рассмотрение при описании плазменно-пылевой системы Земли [1–5]:

1) Основной газовой компонентой атмосферы Марса является углекислый газ (около 95%), и именно частицы сухого льда составляют марсианские мезосферные облака. В свою очередь, пары воды, формирующие композитные ледяные частицы серебристых облаков в ионосфере Земли, несут лишь 0,5% массовой доли газа марсианской атмосферы.

2) Если в условиях земной атмосферы плотность водяных паров ничтожна по сравнению с плотностью азота и кислорода, так что на протяжении всего времени седиментации к поверхности Земли главным тормозящим фактором является вязкое трение, то при оседании частиц в атмосфере Марса ситуация заметно усложняется. В зоне конденсации существенным оказывается фактор торможения пылевой частицы за счет налипания на нее молекул конденсата (аналог реактивной силы), поскольку концентрации десублимирующего углекислого газа велики, а налипающие на поверхность микрочастиц молекулы диоксида углерода обладают ненулевой относительной скоростью. В то же время сила вязкого трения в этом случае обуславливается лишь 5% газов, примесных к углекислому газу атмосферы Марса. В зоне же сублимации уже весь газ марсианской атмосферы создает силу вязкого трения, поскольку относительная скорость испаряющихся молекул диоксида углерода в этом случае равна нулю. Физически это означает, что оторвавшиеся от пылевой частицы молекулы конденсата тормозятся не за счет ускорения микрочастицы, а за счет молекул атмосферы.

Экспериментальные данные были взяты из [6–9].

На основе разработанной модели получено высотное распределение пылевых частиц, составляющих марсианские мезосферные облака. Оказывается, что важным фактором, влияющим на формирование плазменно-пылевых облаков, является неустойчивость Рэля–Тейлора [10], приводящая к тому, что плазменно-пылевые облака могут существовать лишь при достаточно малых значениях размеров составляющих их пылевых частиц, а также к тому, что имеется ограничение (сверху) на толщину плазменно-пылевого облака.

Работа выполнена при частичной 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(7). С. 364–368.
2. Клунов Б. А., Морфилл Г. Е., Попель С. И. Формирование структур в запыленной ионосфере // ЖЭТФ. 2005. Т. 127(1). С. 171–185.
3. Дубинский А. Ю., Попель С. И. Формирование и эволюция плазменно-пылевых структур в ионосфере // Письма в ЖЭТФ. 2012. Т. 96(1). С. 22–28.
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. 913–921.
5. Reznichenko Yu. S., Dubinskii A. Yu., Popel S. I. On dusty plasma formation in Martian ionosphere // J. Phys. Conf. Ser. 2020. V. 1556: 012072.
6. 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 // Sol. Energy. 2016. V. 134. P. 228–235.
7. Bertaux J-L. [et al.]. SPICAM on Mars express: Observing modes and overview of UV spectrometer data and scientific results // J. Geophys. Res. 2006. V. 111: E10S90.
8. Bertaux J-L. [et al.]. SPICAM: studying the global structure and composition of the Martian atmosphere // ESA Special Publication. 2004. V. 1240. P. 95.
9. Forget F. [et al.]. The density and temperatures of the upper martian atmosphere measured by stellar occultations with Mars Express SPICAM // J. Geophys. Res. 2009. V. 114: 01004.
10. Савельев Р. С., Розанов Н. Н., Социлин Г. Б., Чивилихин С. А. Релей-тейлоровская неустойчивость запыленного газа // Науч.-техн. вестник Санкт-Петербургского гос. ун-та информационных технологий, механики и оптики. 2011. Т. 73. С. 18–22.

УДК 524.1

### Идентификация протонов и позитронов в эксперименте PAMELA методами машинного обучения

*А. В. Михайлова, Д. С. Смирнов, В. В. Михайлов (от имени коллаборации PAMELA), П. Е. Мухин<sup>1</sup>*

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

Целью работы является идентификация протонов и позитронов в эксперименте PAMELA [1] новейшими методами машинного обучения, в частности случайным лесом решений, для уточнения имеющихся результатов по потокам электронов и позитронов [2].

Входными данными для отработки являются моделированные и экспериментальные изотропные потоки электронов и позитронов, протонов при жесткостях  $\sim 1,5$  ГВ [1, 2].

Для применения и разработки методики идентификации частиц были предварительно отобраны события с зарядом  $Z=1$  в диапазоне жесткости 1–1,7 ГВ и выбраны критерии разделения на основе сигналов детекторных систем эксперимента — всего 23 признака, основанные на данных калориметра, времяпролетной системы и спектрометра эксперимента.

Предлагаемый алгоритм обработки данных от протонов представлен на рис. 1.

В первую очередь данные были стандартизированы — для каждого признака значения были центрированы и нормированы на значение стандартного отклонения. Далее для каждого признака проводились тесты Манна–Уитни на статистическую значимость различий выборок. По результатам тестов можно удалить признаки, для которых статистическая разница между протонами и позитронами не наблюдается (при уровне значимости 0,001, с учетом поправки Бонферонни–Холма на множественную проверку гипотез).

После удаления из данных этих признаков выборка была разбита на 2 части.

1. Центральные массивы — такие наблюдения, у которых все отклонения значений признаков (кроме жесткости) от среднего значения по модулю не превосходят  $3\sigma$ .

2. Экстремальные наблюдения — такие наблюдения, у которых отклонение хотя бы одного из признаков (кроме жесткости) от среднего превышает значение  $3\sigma$ .

Было замечено, что львиная доля протонов ( $\sim 90\%$ ) содержится именно в центральном массиве, в то время как количество позитронов там крайне невелико (менее 5%). С точки зрения приоритета режекции протонов — эффективнее отказаться от данного массива целиком, нежели рассматривать его как источник данных для обучения классификационной модели. Для оставшегося экстремального массива были также определены признаки, обладающие высокой линейной связанностью с другими признаками;

это было сделано с помощью построения линейных регрессионных моделей для каждого признака, где факторами выступали прочие оставшиеся признаки. Признаки с моделями, множественный коэффициент детерминации которых превосходил 0,85, были удалены из массива данных.

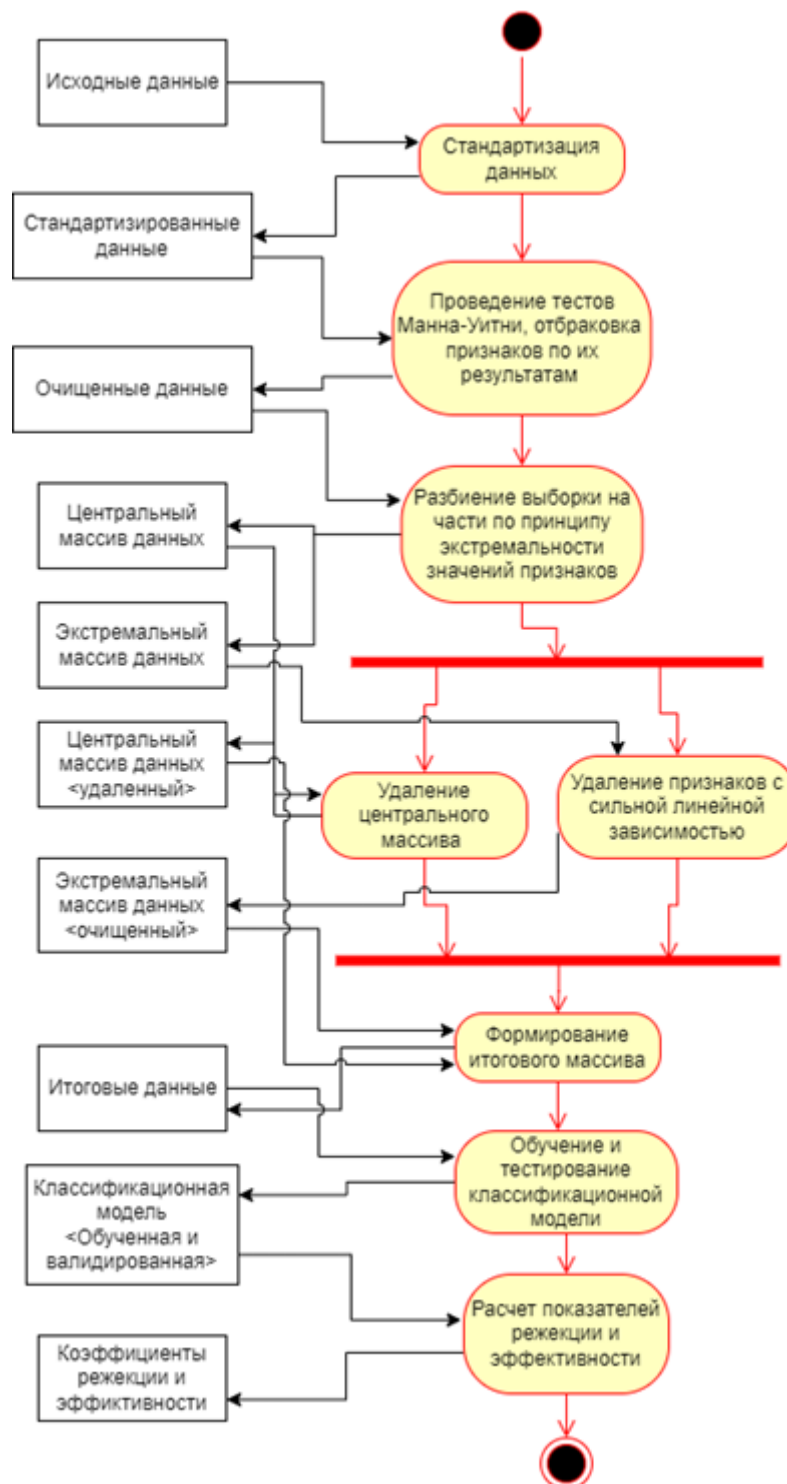


Рис. 1. Предлагаемый алгоритм режекции протонов

На итоговом массиве с оставшимися 18 признаками была обучена и протестирована классификационная модель на основе случайного леса Бреймана [3]. Размер обучающей выборки: 28060 протонов, 3315 позитронов. Оставшиеся частицы использовались для валидации. Результаты:

1) без учета обучающей выборки, процент режекции протонов составил 99,91%; оставлен 1936 протон из 2215199.

2) без учета обучающей выборки, эффективность позитронов составила 87,89%; потерян 442 позитрона из 3651.

С использованием разработанного алгоритма были получены хорошие значения режекции протонов при более высокой эффективности сохранения позитронов, чем в работе [2]. Также за счет выявленной возможности режекции на основе статистических данных была получена возможность сокращения вычислительных затрат по обучению классификационной модели.

### Литература

1. *Picozza P., Galper A.M.* [et al.]. PAMELA — A payload for antimatter matter exploration and light-nuclei astrophysics// *Astropart. Phys.* 2007. V. 27(4). P. 296–315.
2. *Adriani O.* [et al., PAMELA collaboration]. The PAMELA Mission: Heralding a new era in precision cosmic ray physics// *Phys. Rep.* 2014. V. 544(4). P. 323–370.
3. *Breiman L.* Random Forests// *Mach. Learn.* 2001. V. 45(1). P. 5–32.

УДК 524.354.4

## Линия смерти радиопульсаров — «Долина смерти»

*В. С. Бескин<sup>1,2</sup>, А. Ю. Истомин<sup>1</sup>, П. Е. Литвинов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт  
<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Выражение для «линии смерти» радиопульсаров было определено в работе [1] еще в 1975 г. Хотя ее наклон и находится в хорошем согласии с наблюдаемыми данными, с каждым годом все больше и больше пульсаров обнаруживается в «запрещенной зоне». Тем не менее их небольшое относительное количество указывает на то, что на самом деле мы наблюдаем хвост некоторого распределения по тем или иным параметрам. В данной работе анализируется, что может определять ширину «долины смерти» радиопульсаров на диаграмме  $P-\dot{P}$ .

В работе были пересмотрены все основные приближения, которые обычно используются при построении модели генерации вторичной плазмы, но которые могут плохо работать вблизи «линии смерти». Эти уточнения касались электрического потенциала, влияния спектра излучения первичных частиц и эффектов общей теории относительности. В качестве критерия «жизни» пульсара выбиралось следующее условие: найдется  $\gamma$ -квант, двигающийся по направлению к звезде, который успеет родить пару, прежде чем достигнет ее поверхности. В результате было сформулировано условие, необходимое для каскадной генерации частиц, которые мы будем рассматривать здесь как уравнение, определяющее «линию смерти» на диаграмме  $P-\dot{P}$ .

В работе предполагалось, что из-за неравномерности образования вторичной плазмы во времени практически всю область открытых силовых линий можно рассматривать в вакуумном приближении:  $\rho_e = 0$ . Используя это приближение, было построено точное трехмерное решение для продольного электрического поля  $E_{\parallel}$  в полярных областях нейтронной звезды.

Также были учтены поправки, связанные общей теорией относительности. Данные эффекты приводят к изменению электрического потенциала ( $\psi_{GR} = K_{\psi}\psi$ ), что важно при расчете энергий первичных частиц, поправке к кривизне силовых линий ( $R_{c,GR} = K_{cur}R_c$ ) и увеличению магнитного поля на поверхности ( $B_{0,GR} = K_B B_0$ ).

Кроме этого, было принято во внимание, что вторичные частицы, генерируемые на наименьшем расстоянии от места излучения  $\gamma$ -квантов, соответствуют энергии  $\gamma$ -квантов  $\xi\hbar\omega_c$ , которая может значительно превышать характерную энергию изгибающего излучения  $\hbar\omega_c$ , где  $\omega_c = \frac{3}{2} \frac{c}{R_c} \gamma_e^3$ .

В итоге условие формирования каскада принимает следующий вид:

$$P_{\max} = 0,7\xi^{2/15} \frac{K_{\psi}^{2/5}}{K_{cur}^{4/15}} f_{1,6}^{3/5} \Lambda_{15}^{2/15} R_{12}^{19/15} B_{12}^{8/15} x_0^{4/15} p^{2/5} s.$$

Здесь  $f_{1,6} = \frac{f_*}{1,6}$ ,  $\Lambda = 15-20$  — логарифмический фактор:  $\Lambda \approx \Lambda_0 - 3\ln\Lambda_0$ ,  $\Lambda_{15} = \Lambda/15$ ,  $R_{12} = R/(12km)$ ,

$$\Lambda_0 = \ln \left[ \frac{e^2 \omega_B R_c}{\hbar c} \left( \frac{B_{cr}}{B} \right)^2 \left( \frac{m_e c^2}{E_{ph}} \right)^2 \right] \text{ и } I_{100} = I_r / (100 M_{\odot} km^2).$$

Наконец, два последних параметра,

$$x_0 = r_m/R_0, \quad p(r_m, \varphi_m) = \left( \cos\chi + \frac{3}{4}x_0 \frac{R_0}{R} \sin\chi \cos\varphi_m \right) (1 - x_0^2)$$

определяют зависимость от положения силовой линии на полярной шапке.

Для сопоставления полученных результатов с наблюдениями необходимо выразить неизвестное магнитное через период и производную периода, т. е. воспользоваться моделью торможения. Согласно наиболее популярной модели, основанной на аппроксимации численного счета, имеем  $\dot{P}_{\text{MHD}} = \frac{\pi^2 B_0^2 R^6}{P I_r c^3} (1 + \sin^2\chi)$ . С другой стороны, согласно полуаналитической модели, для не ортогональных пульсаров вблизи линии смерти можно написать  $\dot{P}_{\text{BGI}} = \frac{\pi^2 f_*^2 B_0^2 R^6}{P I_r c^3} \cos^2\chi$ .

В итоге, для обеих моделей получается выражение вида:  $\dot{P}_{-15} = \beta_d P^{11/4}$ , где теперь

$$\begin{aligned} \beta_d^{\text{MHD}} &= 2,1 \xi^{-1/2} K_{\text{GR}} f_{1.6}^{-9/4} \Lambda_{15}^{-1/2} R_{12}^{5/4} I_{100}^{-1} h(x_0) F^{\text{MHD}}, \\ \beta_d^{\text{BGI}} &= 0,8 \xi^{-1/2} K_{\text{GR}} f_{1.6}^{-17/4} \Lambda_{15}^{-1/2} R_{12}^{5/4} I_{100}^{-1} h(x_0) F^{\text{BGI}}. \end{aligned}$$

Здесь коэффициент  $K_{\text{GR}} = \frac{K_{\text{cur}}}{K_B^2 K_\Psi^{3/2}}$  описывает поправки общей теории относительности, а функции  $F(x_0, \chi)$  — зависимость от положения силовой линии.

Таким образом, было показано, что долина смерти на диаграмме  $P-\dot{P}$  достаточно широка, чтобы объяснить все наблюдаемые источники даже для дипольного магнитного поля. Наилучшее согласие имеет место в модели BGI, хотя и модель MHD с учетом вполне разумных дополнительных допущений не противоречит наблюдениям. Это еще раз доказывает, что с самого начала мы правильно понимали природу активности радиопульсаров.

### Литература

1. Ruderman M. A., Sutherland P. G. Theory of pulsars: polar gaps, sparks, and coherent microwave radiation // *Astrophys. J.* 1975. V. 196. P. 51–72.



---

# Секция лазерных систем и структурированных материалов

---

Председатель: В. В. Глушков (д. ф.-м. н., доцент)

Зам. председателя: А. М. Кузьменко (к. ф.-м. н.)

Секретарь: Е. А. Пластинин

---

Дата: 04.04.2023

Время: 15:00

УДК 538.911

## Quantum phenomena revealed by dipolar coupled H<sub>2</sub>O molecular network

*V. Uskov<sup>1</sup>, M. Savinov<sup>2</sup>, V. A. Abalmasov<sup>3</sup>, E. S. Zhukova<sup>1</sup>, V. G. Thomas<sup>4</sup>, B. Gorshunov<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), Moscow, Russia

<sup>2</sup>Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic

<sup>3</sup>Institute of Automation and Electrometry SB RAS, Novosibirsk, Russia

<sup>4</sup>Institute of Geology and Mineralogy, RAS, Novosibirsk, Russia; Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

For decades intense research activities tackle the question whether water molecules with their rather strong dipole moment of 1.85 Debye can condense into a ferroelectrically or antiferroelectrically ordered state. In liquid water or water ice such ordering does not happen due to intermolecular hydrogen bonds that overwhelm dipolar interaction. The existence of a so-called “water ferroelectricity” has been the subject of debate for decades. It is believed that water ferroelectricity can play crucial role in a variety of phenomena and areas of natural sciences. It turned out, however, that a detailed study of the phenomenon is hampered by the difficulties of its implementation in laboratory conditions. Since years, corresponding experimental results remained controversial, so that the community had to be “satisfied” with theoretical considerations and computer simulations of possible ordering of H<sub>2</sub>O molecular dipoles.

We found an ideal workbench for studying single-particle and collective effects, including ferroelectricity, in ensembles of dipole–dipole coupled water molecules. It is provided by hydrated dielectric crystals of the beryl family. The crystals contain just separate H<sub>2</sub>O molecules isolated within nanosized voids formed by the lattice ions. Being only weakly linked to the ions and separated by 5–10 Å, the water molecules do not experience H-bonding (interaction length 1–2 Å); nevertheless, they interact via longer-range dipole–dipole coupling (interaction length 10–100 Å). This kind of network is of broad interest and fundamental importance providing the opportunity to study not only the famous “water ferroelectricity”, but also diverse quantum physics of electric-dipolar systems whose properties should be qualitatively different from those occurring in well studied systems with magnetic moments.

We have discovered quantum paraelectricity [1, 2] and fingerprints of quantum critical behavior [3], below 20–30 K, of a network of H<sub>2</sub>O molecules hosted by the hexagonal matrix of beryl crystal lattice. Below  $T=0.5$  K, we discover an ordered state of water molecules, with the phase transition of yet unknown nature. In orthorhombic matrix of a relative crystal, cordierite, we have observed an order-disorder type ferroelectric phase transition [4], at around 3 K, into a complex ferroelectrically/antiferroelectrically ordered state of polar H<sub>2</sub>O molecules. In addition to collective phenomena, we studied single-particle excitation of translational and librational types of separate nano-confined H<sub>2</sub>O/D<sub>2</sub>O molecules [5, 6]. Our recent research shows influence of internal pressure on incipient ferroelectricity of nano-confined water molecules [7].

The research was supported by the Russian Science Foundation, Grant 22-22-00091.

### References

1. *Gorshunov B.* [et al.]. Quantum Behavior of Water Molecules Confined to Nanocavities in Gemstones // *J. Phys. Chem. Lett.* 2013. V. 4. P. 2015–2020.
2. *Gorshunov B.* [et al.]. Incipient ferroelectricity of water molecules confined to nano-channels of beryl // *Nat. Commun.* 2016. V. 7: 12842.

3. *Belyanchikov M. A.* [et al.]. Fingerprints of critical phenomena in a quantum paraelectric ensemble of nanoconfined water molecules // *Nano Lett.* 2022. V. 22(8). P. 3380–3384. DOI: 10.1021/acs.nanolett.2c00638.
4. *Belyanchikov M. A.* [et al.]. Dielectric ordering in dipolar lattice of water in cordierite // *Nat. Commun.* 2020. V. 11: 3927. DOI: 10.1038/s41467-020-17832-y.
5. *Belyanchikov M. A.* [et al.]. Vibrational states of nano-confined water molecules in beryl investigated by first principles calculations and optical experiments // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2017. V. 19(45). P. 30740–30748.
6. *Belyanchikov M. A.* [et al.]. Single-particle and collective excitations of polar water molecules confined in nano-pores within cordierite crystal lattice // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2022. V. 24(11). P. 6890–6904. DOI: 10.1039/d1cp05338h.
7. *Gorshunov B.* [et al.]. Effect of internal pressure on incipient ferroelectricity of nano-confined water molecules observed in hydrothermally grown beryl crystals // *Phys. Status Solidi B.* DOI: 10.1002/pssb.202200405. IF1.782.

УДК 538.958

## Влияние ионов меди на транспортные и релаксационные свойства гидратированных эумеланинов

*П. А. Абрамов, С. С. Жуков, К. А. Мотовилов*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Эумеланины, пигменты кожи человека, представляющие собой различные производные полииндолхинона, обладают уникальным сочетанием физических и химических свойств. Материал уже нашел многочисленные применения в области биоэлектроники. Однако его гидратационно-зависимая проводимость недостаточно хорошо изучена. Кроме того, до сих пор не существует работ, учитывающих одновременно контроль влажности, а также различные концентрации допирования ионами металлов. В данной работе мы представляем первое подобное исследование транспортных и релаксационных характеристик синтетического эумеланина, допированного ионами  $\text{Cu}^{2+}$  (0,06 ммол/г и 0,46 ммол/г), при контролируемых величинах гидратации в диапазоне частот  $10^{-3}$  Гц ÷ 1 МГц.

Для измерения диэлектрических свойств образцов порошки эумеланина прессовались в таблетки диаметром 5 мм и толщиной примерно 700 мкм под давлением 800 МПа. На образцы были напылены золотые (99,99%) электроды диаметром 4 мм. Измерения производились посредством импеданс-анализатора MFIA Zurich Instruments при постоянной температуре и различных степенях увлажнения. Для контроля количества влаги, поглощенной образцом, была создана камера, аналогичная описанной в литературе [1]. Содержание воды в эумеланинах определялось двумя независимыми методами: путем измерения давления внутри установки с помощью цифрового мембранного манометра (VACUU SELECT, Vacuubrand, Германия) и измерения относительной влажности и температуры с помощью коммерческого датчика Si7021. Количество воды, поглощенной образцом, оценивалось в соответствии с опубликованными изотермами адсорбции [1–4].

Для анализа измеренные импедансы образцов были пересчитаны в величины комплексных диэлектрической проницаемости и проводимости. Было показано, что независимо от степени увлажнения при постоянной температуре все образцы эумеланинов демонстрируют только одну релаксацию Гавриляка–Негами (HN) [5], а низкочастотное поведение хорошо описывается моделью аномальной диффузии Пуассона–Нернста–Планка (PNPA) [6] (пример фита для чистого эумеланина при 50% отн. влажности приведен на рис. 1). Мы обнаружили, что с увеличением степени гидратирования материала частота релаксации Гавриляка–Негами увеличивается. Ионы  $\text{Cu}^{2+}$  не вызывают появления дополнительных релаксационных процессов, но частично замедляют те, которые присутствуют в чистом эумеланине. Кроме того, ионы меди уменьшают проводимость материала. Мы связываем релаксацию Гавриляка–Негами с синтезом и истощением ароматических протонированных семихинонов в системе. При низком содержании воды ароматические незаряженные стеки имеют ключевой вклад в увеличение общей поляризуемости эумеланина, в то время как эффекты дестекинга оказывают принципиальное влияние на снижение поляризуемости при высоком содержании воды. Были обнаружены дополнительные свидетельства, согласующиеся с ранее предложенными моделями [7], предполагающими координацию между подвижностью протонов и подвижностью семихиноновых радикалов. По существу ионы меди действуют как ловушка для радикалов, уменьшая подвижность, что приводит к уменьшению подвижности протонов и, следовательно, проводимости.

Авторы выражают благодарность А. Б. Мостерту за синтез материалов для исследования. Работа была выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-73-10154.

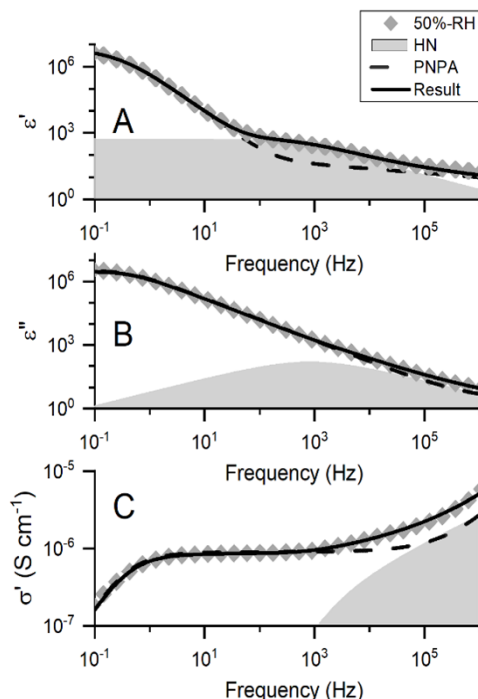


Рис. 1. Экспериментально полученные диэлектрические спектры чистого синтетического эумеланина в условиях относительной влажности 50% и 27°C с соответствующими фитами для моделей HN и PNPA. *A*—частотная зависимость действительной части диэлектрической проницаемости  $\epsilon'$ ; *B*—частотная зависимость мнимой части диэлектрической проницаемости  $\epsilon''$ ; *C*—частотная зависимость действительной части проводимости  $\sigma'$ . Закрашенные области под кривыми на панелях *A–C* изображают частотную дисперсию релаксации Гавриляка–Негами. Черная штриховая линия соответствует модели PNPA. Сумма фитов HN и PNPA представлена в виде черной сплошной линии

## Литература

1. *Mostert A. B.* [et al.]. Gaseous adsorption in melanins: Hydrophilic biomacromolecules with high electrical conductivities//*Langmuir*. 2010. V. 26(1). P. 412–416. DOI: 10.1021/la901290f.
2. *Martinez-Gonzalez J. A.* [et al.]. Interfacial water morphology in hydrated melanin//*Soft Matter*. 2021. V. 17(34), P. 7940–7952. DOI: 10.1039/D1SM00777G.
3. *Powell M. R., Rosenberg B.* The nature of the charge carriers in solvated biomacromolecules//*J. Bioenerg.* 1970. V. 1(6). P. 493–509. DOI: 10.1007/BF01517187.
4. *Simonović B.* Termalna Analiza Melanina: Doktorska Disertacija; 1989.
5. *Havriliak S., Negami S.* A complex plane representation of dielectric and mechanical relaxation processes in some polymers//*Polymer*. 1967. V. 8. P. 161–210. DOI: 10.1016/0032-3861(67)90021-3.
6. *Scarfone A. M., Barbero G., Evangelista L. R., Lenzi E. K.* Anomalous diffusion and surface effects on the electric response of electrolytic cells//*Physchem*. 2022. V. 2(2). P. 163–178. DOI: 10.3390/physchem2020012.
7. *Bedran Z. V.* [et al.]. Water-activated semiquinone formation and carboxylic acid dissociation in melanin revealed by infrared spectroscopy//*Polymers*. 2021. V. 13(24): 4403. DOI: 10.3390/polym13244403.

УДК 535-14

## Терагерцевая спектроскопия высокоэнтропийных соединений на основе гексаферрита

*А. А. Гурченко<sup>1</sup>, Д. А. Винник<sup>2</sup>, В. Е. Живулин<sup>2</sup>, Н. А. Черкасова<sup>2</sup>, А. Р. Зыкова<sup>2</sup>, С. А. Гудкова<sup>2</sup>,  
Б. П. Гориунов<sup>1</sup>, Л. Н. Алябьева<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Южно-Уральский государственный университет

Одно из перспективных направлений в современном материаловедении связано с созданием и применением высокоэнтропийных систем. В последние десятилетия эта деятельность была сосредоточена в основном на металлических сплавах. В настоящее время одной из быстро развивающихся новых областей являются исследования возможностей создания высокоэнтропийных кристаллических твердых раство-

ров со структурой магнетоплюмбита. Наиболее популярными здесь являются гексаферриты М-типа, которые известны уже более полувека благодаря своим замечательным свойствам — химической инертности, механической твердости, высоким значениям температуры Кюри, коэрцитивной силы и поля анизотропии. Обладая такими свойствами, эти соединения широко используются в различных отраслях науки и техники. В последние десятилетия интерес к гексаферритам еще более возрос в связи с возможностью их использования в высокочастотной электронике. Было показано, что терагерцевые диэлектрические свойства этих соединений могут плавно «перестраиваться» путем изменения их химического состава (см., например, [1]). Создание высокоэнтропийных фаз гексаферритов предоставит еще более широкие возможности для эффективной настройки их электродинамических свойств в широком диапазоне за счет плавного количественного изменения состава. Недавно нам удалось синтезировать и стабилизировать высокоэнтропийные кристаллические твердые растворы таких систем (см., например, [2]). В данном докладе мы представляем первое систематическое исследование терагерцевых спектров комплексной диэлектрической проницаемости  $\epsilon^*(\nu) = \epsilon'(\nu) + i\epsilon''(\nu)$  серии керамических соединений  $\text{BaFe}_{12-x}(\text{Ti, Mn, In, Ga})_x\text{O}_{19}$  ( $x = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$ ) на частотах  $\nu = 0,2 \div 1$  ТГц и в интервале температур от комнатной до температуры жидкого гелия. Измерения проводились с использованием импульсного спектрометра с временным разрешением Menlo Tera K15. На рис.1 представлены типичные результаты — спектры действительной  $\epsilon'$  и мнимой  $\epsilon''$  частей диэлектрической проницаемости выбранного соединения с  $x = 7$ . Спектры указывают на наличие высокочастотного инфракрасного фонованого резонанса. При охлаждении терагерцевое поглощение, описываемое  $\epsilon''(\nu)$ , уменьшается, скорее всего, из-за сужения инфракрасного резонанса. При высоких температурах низкочастотный наклон спектра  $\epsilon''(\nu)$  не экстраполируется к нулю, что указывает на наличие низкочастотного возбуждения, которое затухает при охлаждении. Мы обсудим зависимости терагерцевых диэлектрических свойств семейства  $\text{BaFe}_{12-x}(\text{Ti, Mn, In, Ga})_x\text{O}_{19}$  от температуры и состава  $x$ , сравним их со спектрами низкоэнтропийных аналогов  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ti}_x\text{O}_{19}$  и проанализируем происхождение обнаруженных возбуждений.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (18-73-10049).

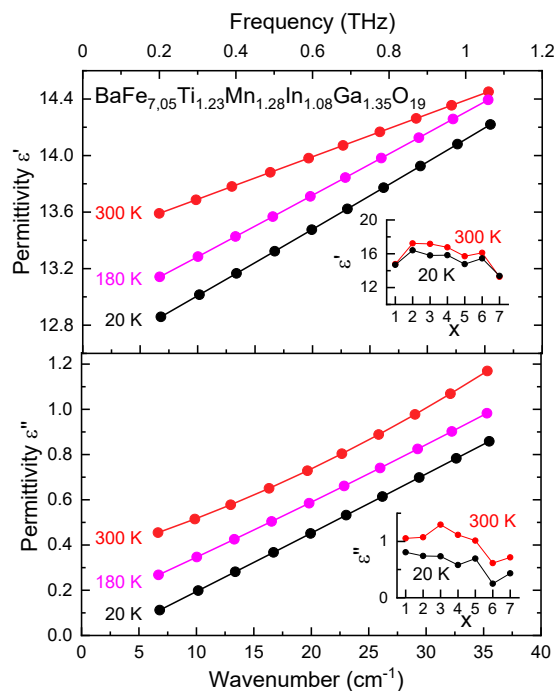


Рис. 1. Терагерцевые спектры высокоэнтропийного соединения  $\text{BaFe}_{7,05}\text{Ti}_{1,23}\text{Mn}_{1,28}\text{In}_{1,08}\text{Ga}_{1,35}\text{O}_{19}$ . На вставках показана зависимость  $\epsilon'$  и  $\epsilon''$  от  $x$  при двух температурах

### Литература

1. Alyabyeva L. N. [et al.]. Lead-substituted barium hexaferrite for tunable terahertz optoelectronics // NPG Asia Mater. 2021. V. 13: 63.
2. Zhivulin V. E. [et al.]. Creation and magnetic study of ferrites with magnetoplumbite structure multisubstituted by  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{Cr}^{3+}$ ,  $\text{Ga}^{3+}$ , and  $\text{In}^{3+}$  cations // Nanomaterials. 2022. V. 12: 1306.

## Стабилизация частоты полупроводникового лазера с помощью эффекта Зеемана

*Н. А. Капритов<sup>1,3</sup>, А. В. Масалов<sup>2,3</sup>, А. И. Львовский<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН (СФ ФИАН)

<sup>3</sup>Российский квантовый центр

В работе осуществлена привязка частоты полупроводникового лазера к линии поглощения в парах рубидия [1], являющейся стабильным оптическим репером.

При наложении на ячейку с парами рубидия продольного магнитного поля возникает зеемановское расщепление магнитных подуровней рубидия, причем сдвиг подуровней, переходы с которых возбуждаются светом с различной круговой поляризацией, происходит в разные стороны. Это позволяет, вычитая друг из друга сигналы пропускания ячейки, отвечающие излучению с левой и правой круговыми поляризациями (рис. 1), получить разностный сигнал, который может быть использован в качестве сигнала ошибки обратной связи системы активной стабилизации частоты.

Для пространственного разделения лазерного излучения с правой и левой круговой поляризацией была собрана оптическая схема (рис. 2): в ней лазерное излучение проходит через пары рубидия, магнитные подуровни которого испытывают зеемановский сдвиг, далее левая и правая круговые поляризации переводятся пластинкой  $\lambda/4$  в вертикальную и горизонтальную поляризации и разделяются в пространстве с помощью поляризационного светоделителя (PBS), после чего сигналы регистрируются фотодетекторами.

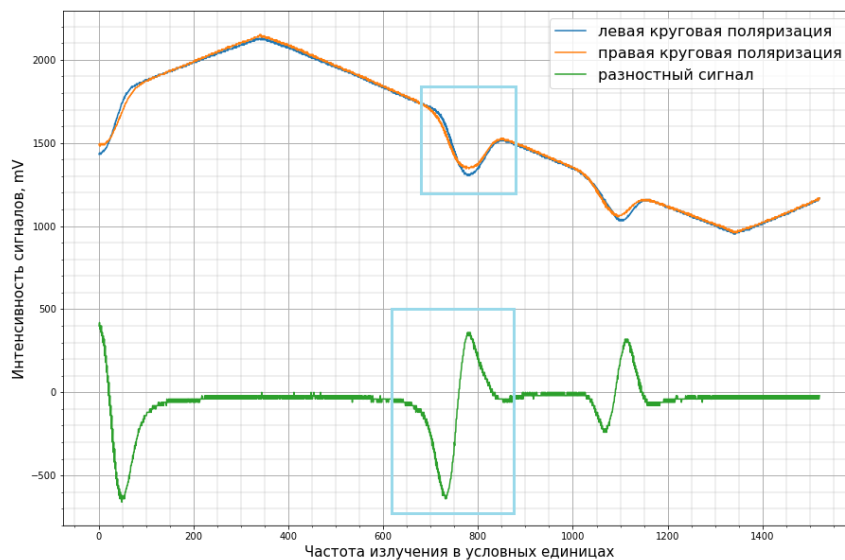


Рис. 1. Сигналы пропускания ячейки с рубидием излучением с левой (синяя линия) и правой (оранжевая линия) круговой поляризацией и разность этих сигналов (зеленая линия). График получен при перестройке частоты лазера во времени; по горизонтальной оси отложена частота излучения лазера в условных единицах; область атомного резонанса, отвечающая провалу в сигнале пропускания, выделена на графиках голубыми вставками

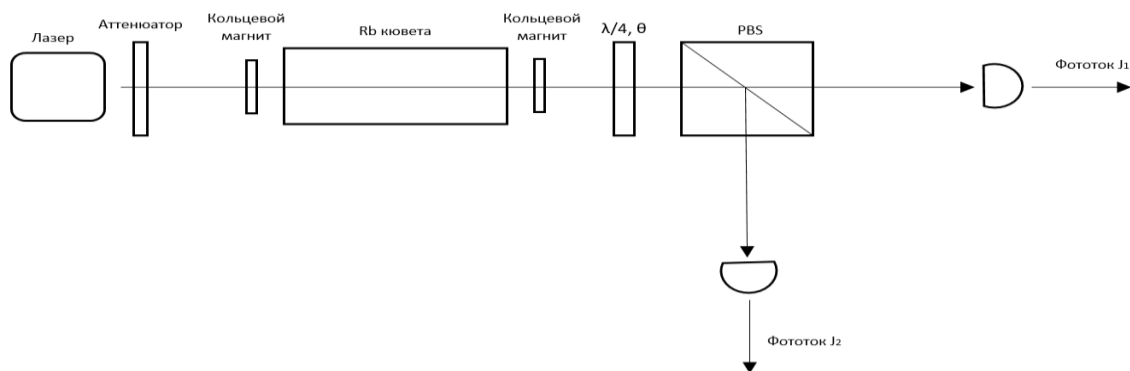


Рис. 2. Оптическая схема, выполняющая пространственное разделение сигналов с левой и правой круговой поляризацией

Для обработки сигналов с фотодетекторов собрана электронная схема (рис. 3), выполняющая аналоговое вычитание сигналов разной круговой поляризации, оцифровку полученной разности, ее обработку при помощи PID-алгоритма, создание и усиление аналогового управляющего сигнала, подстраивающего частоту лазера при ее отклонении от частоты атомного резонанса.

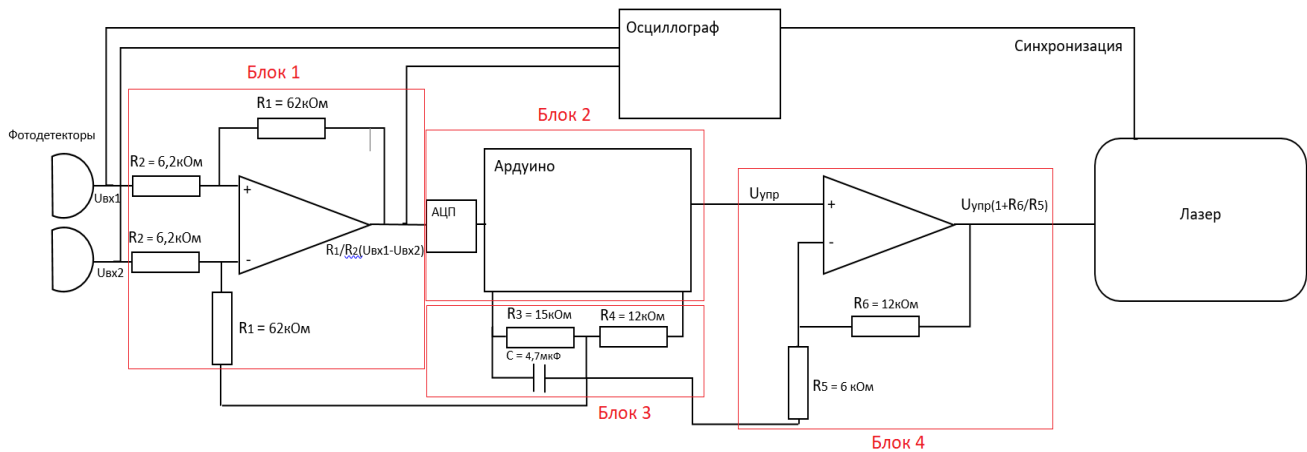


Рис. 3. Электронная схема, выполняющая обработку сигналов с фотодетекторов и создание управляющего сигнала. Блок 1 — вычитание сигналов с фотодетекторов; блок 2 — обработка разностного сигнала и создание управляющего сигнала; блок 3 — блок делителя напряжения; блок 4 — усиление аналогового управляющего сигнала

Сравнение динамики частоты полупроводникового лазера без стабилизации и в режиме стабилизации (рис. 4) показывает, что активная обратная связь успешно подавляет дрейф частоты лазерного излучения. В режиме, когда стабилизация не активна, частота лазера дрейфует на несколько десятков мегагерц в секунду.

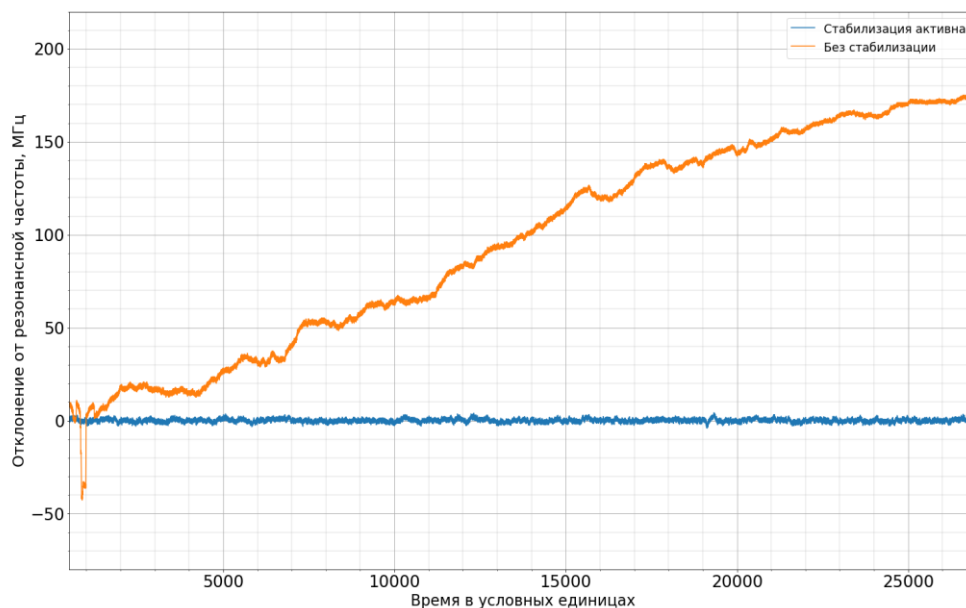


Рис. 4. Динамика частоты лазера в режиме включенной (синяя линия) и выключенной (оранжевая линия) стабилизации

Таким образом, в работе показано, что лазер, стабилизированный представленной схемой, более 70% времени находится в пределах 1 МГц и более 95% в пределах 2 МГц от резонансной частоты. В сравнении, лазер без стабилизации уже через несколько минут «уплывает» более, чем на 50 МГц, от своей резонансной частоты. Также была продемонстрирована возможность стабилизации лазера на частоту, смещенную относительно резонансной до 200 МГц.

### Литература

1. Corwin K.L. [et al.]. Frequency-stabilized diode laser with the Zeeman shift in an atomic vapor // Appl. Opt. 1998. V. 37(15). P. 3295–3298.

## Передача орбитального момента света спиновой системе в пленке феррит-граната

С. Коларь<sup>1,2</sup>, М. Кожжаев<sup>2</sup>, А. Федоров<sup>1,2</sup>, В. Белотелов<sup>2,3</sup>, А. Чернов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Российский квантовый центр

<sup>3</sup>Московский государственный университет

Возбуждение и управление спиновыми волнами с помощью лазерных импульсов открывает новые возможности для оптомагнитной записи информации, а также обработки и передачи информации со сверхнизким поглощением энергии [1, 2]. Параметры спиновых волн можно задавать с помощью размеров пучков на образце, внешним магнитным полем, в котором находится образец, поляризацией излучения, углом падения лазерных пучков и так далее. В данной работе мы исследуем возбуждение спиновых волн пучками света с орбитальным моментом.

В работе была рассмотрена динамика прецессии намагниченности во времени при возбуждении фемтосекундными лазерными импульсами в пленке железно-иттриевого граната. Экспериментальное исследование проводилось с помощью техники накачка–зондирование, где лазерный луч разделяется на два луча. Первый луч — луч накачки — возбуждает с помощью магнитооптических эффектов локальное изменение намагниченности в образце, а второй луч — луч зондирования, проходящий на образец в то же место, с помощью прямого эффекта Фарадея, детектирует наведенное изменение намагниченности образца в конкретный момент времени. Луч накачки обычно в десятки или сотни раз мощнее луча зондирования. Схема оптической экспериментальной установки показана на рис. 1.

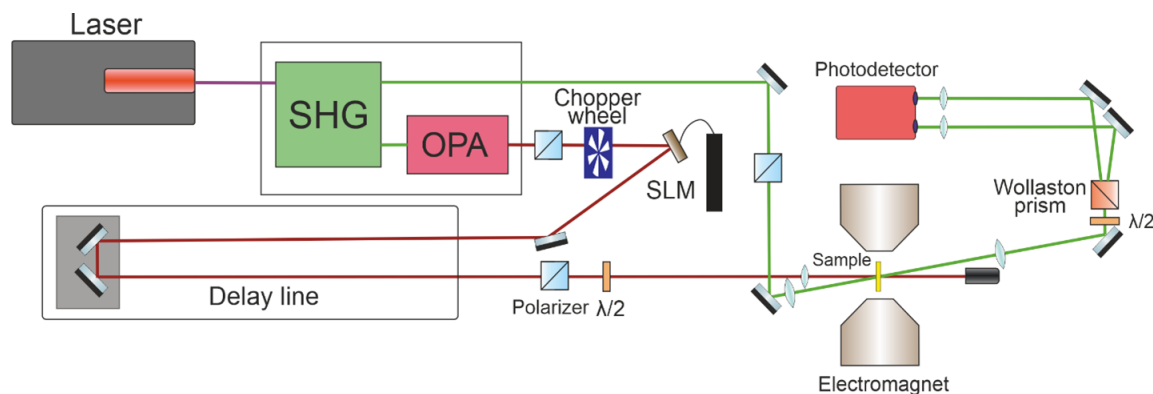


Рис. 1. Экспериментальная установка «накачка–зондирование»

Прецессия намагниченности, возбуждаемая таким образом, приводит к возбуждению спиновых волн. В данной работе мы исследуем спиновые волны, возбуждаемые оптическими вихрями. Оптические вихри — это пучки света с закрученной фазой. В некоторых случаях такие пучки несут в себе орбитальный угловой момент. Пучки такого рода создавались с помощью пространственного модулятора света (Spatial Light Modulator — SLM). Профили пучков с разным орбитальным моментом показаны на рис. 2.

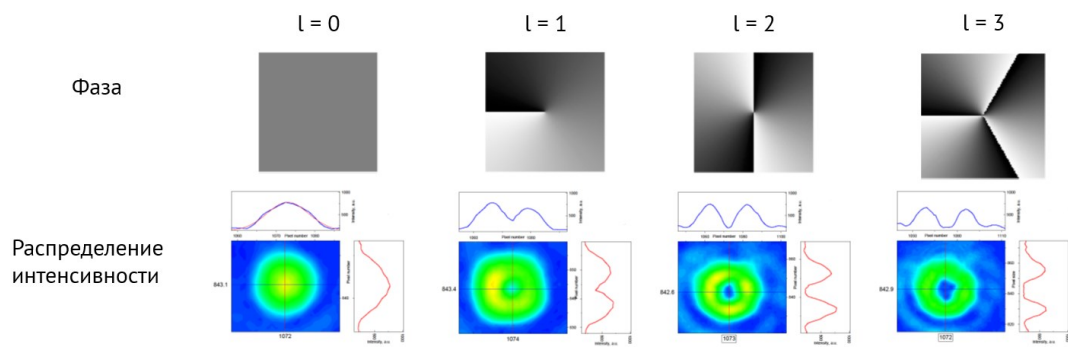


Рис. 2. Профили оптических вихрей, используемых для возбуждения спиновых волн

Для возбуждения спиновых волн использовался обратный магнитооптический эффект Коттона–Мутона. Данный эффект наблюдается при линейной поляризации луча накачки, при этом амплитуда

возбуждаемых спиновых волн зависит от угла поляризации [3]. Для того чтобы обнаружить эффект от орбитального момента света, была выбрана поляризация накачки, при которой эффект Коттона–Мутона минимален. В данной конфигурации был проведен основной эксперимент, который состоял в том, чтобы возбуждать спиновую прецессию с помощью пучков с разным орбитальным моментом и наблюдать за изменением параметров спиновых волн, таких как амплитуда, фаза, частота и так далее. На рис. 3 представлена амплитуда, нормированная на плотность мощности пучков накачки, в зависимости от числа орбитального момента тех же пучков.

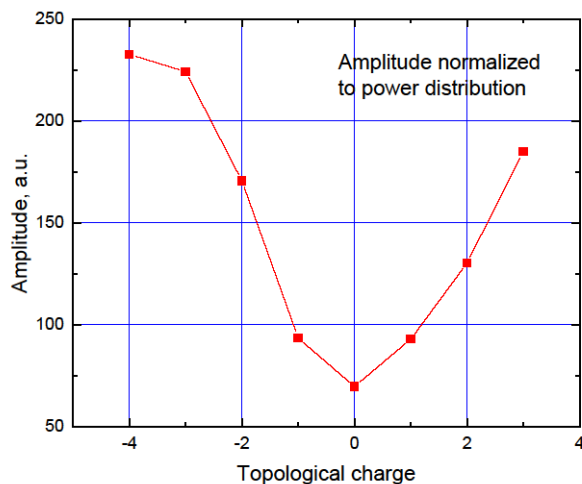


Рис. 3. Зависимость нормированной амплитуды от числа орбитального момента

Было обнаружено, что нормированная амплитуда возрастает по мере увеличения значения орбитального момента света, который возбуждает спиновую прецессию. Тем самым было продемонстрировано, что орбитальный момента света позволяет возбуждать прецессию намагниченности в диэлектрических образцах на основе феррита–граната, при этом механизм возбуждения отличен от изученных ранее обратных магнитооптических эффектов.

Работа была поддержана проектом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, мегагрант № 075-15-2022-1108.

### Литература

1. Chumak A. V., Vasyuchka V. I., Serga A. A., Hillebrands B. Magnon Spintronics // Nat. Phys. 2015. V. 11(6). P. 453–461. DOI: 10.1038/nphys3347.
2. Dutta S., Chang S. C., Kani N., Nikonov D. E., Manipatruni S., Young I. A., Naeemi A. Non-volatile clocked spin wave interconnect for beyond-CMOS nanomagnet pipelines // Sci. Rep. 2015. V. 5(1):9861. DOI: 10.1038/srep09861.
3. Kimel A. V. [et al.]. Ultrafast non-thermal control of magnetization by instantaneous photomagnetic pulses // Nature. 2005. V. 435. P. 655–657.

УДК 538.958

### Динамика молекул H<sub>2</sub>O и D<sub>2</sub>O, локализованных внутри фуллеренов C<sub>60</sub>

А. В. Мелентьев<sup>1</sup>, М. Sajadi<sup>2</sup>, Б. П. Горшун<sup>1</sup>, С. С. Жуков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Fritz-Haber-Institut der MPG, Berlin, Germany; Department of Chemistry, University of Paderborn, Paderborn, Germany

Эндофуллерены — комплексы из молекулы C<sub>60</sub> и одиночного атома или молекулы, локализованной внутри. Эти соединения являются перспективными кандидатами для построения систем квантовых вычислений [1, 2], органических фотовольтаиков и контрастирующего вещества при проведении МРТ [3].

В данной работе методами инфракрасной и терагерцевой спектроскопии была изучена динамика молекул воды в эндофуллеренах H<sub>2</sub>O@C<sub>60</sub> и D<sub>2</sub>O@C<sub>60</sub>. Прежде проводились исследования эндофуллерена воды методами неупругого нейтронного рассеяния, ядерного магнитного резонанса, инфракрасной спектроскопии и другими [4–6]. Обнаружены линии поглощения в терагерцевой части спектра, связанные



с вращательными переходами молекулы воды  $0_{00} — 1_{11}$  ( $33 \text{ см}^{-1}$ ),  $1_{01} — 1_{10}$  ( $17 \text{ см}^{-1}$ ) и  $1_{01} — 2_{12}$  ( $51 \text{ см}^{-1}$ ) и квантованием движения центра масс молекулы в условиях локализации ( $\approx 110 \text{ см}^{-1}$ ).

Эндофуллерены воды и тяжелой воды были синтезированы химическим способом, названным «молекулярной хирургией» [7], и очищены хроматографическими методами. Из полученного порошка с помощью прессования давлением  $\approx 400 \text{ МПа}$  формировались поликристаллические таблетки толщиной  $150 \div 250 \text{ мкм}$ . Для измерений использовались образцы с долей заполненных фуллеренов для  $\text{H}_2\text{O}$  — 5% и 100%, для  $\text{D}_2\text{O}$  — 78%. Спектры пропускания образцов в диапазоне от 10 до  $100 \text{ см}^{-1}$  были получены с помощью импульсного терагерцевого спектрометра TeraView TPS Spectra 3000, в диапазоне от 100 до  $8000 \text{ см}^{-1}$  — с помощью инфракрасного спектрометра Bruker Vertex v80. Измерения при температурах от комнатной до 6 К проводились в гелиевом криостате на обменном газе.

На рис. 1 изображен широкодиапазонный спектр пропускания эндофуллерена с 100% заполнением водой, полученный при температуре 50 К. С одной стороны, эта температура ниже известных фазовых переходов фуллерита (90 К и 260 К), поэтому кристаллическая структура исследованных образцов такая же, как и при гелиевых температурах. С другой стороны, температура достаточно высока, чтобы увидеть часть переходов молекулы воды из состояний выше основного. Из анализа спектров пропускания образцов с 5% и 100% содержанием воды следует, что частота линий вращательных переходов совпадают в эндофуллеренах, но отличаются от таковых для воды в газовой фазе примерно на 10%. Таким образом, можно считать, что вращательная динамика молекул  $\text{H}_2\text{O}$  практически не меняется при инкапсуляции и в основном искажена взаимодействием с потенциалом  $\text{C}_{60}$ , а не взаимодействием молекул друг с другом. Линии, не соответствующие вращательным переходам свободной молекулы воды в диапазоне  $10 \div 300 \text{ см}^{-1}$ , мы относим к трансляционным и вращательно-трансляционным переходам. На участке  $300 \div 1500 \text{ см}^{-1}$  лежат линии колебательных переходов молекул фуллерена. Их частоты слегка (в пределах  $2 \text{ см}^{-1}$ ) смещены относительно пустого  $\text{C}_{60}$ . Знак и величина смещения зависят от характера колебания. Например, сферически симметричная «дыхательная» мода  $A_g$  на  $490 \text{ см}^{-1}$  имеет максимальное смещение  $2 \text{ см}^{-1}$ , а мода  $\text{H}_{u1}$  на  $490 \text{ см}^{-1}$  с преобладающим тангенциальным движением атомов углерода не смещена. Этот эффект наблюдается как в спектрах  $\text{H}_2\text{O}@\text{C}_{60}$ , так и в спектрах  $\text{D}_2\text{O}@\text{C}_{60}$ . Наиболее вероятные причины такого смещения — электростатическое взаимодействие инкапсулированных молекул с  $\text{C}_{60}$ .

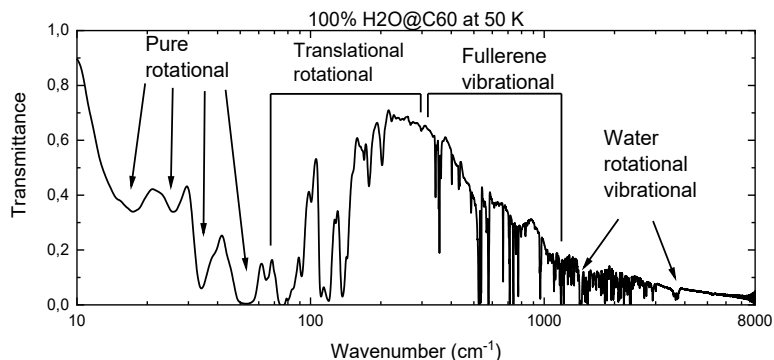


Рис. 1. Широкодиапазонный спектр пропускания таблетки  $\text{H}_2\text{O}@\text{C}_{60}$  при температуре 50 К. Стрелками и скобками показаны линии поглощения, связанные с вращательными, трансляционными и колебательными переходами молекулы воды, а также с колебательными переходами самого фуллерена

На рис. 2 приведены спектры пропускания образца 78%  $\text{D}_2\text{O}@\text{C}_{60}$ . При температурах выше 50 К множество линий поглощения, связанных с вращательно-трансляционной динамикой, сливаются в один широкий пик поглощения. По мере понижения температуры этот пик сдвигается вниз по частоте, и составляющие его линии обужаются. Необходимо отметить, что при температуре 5 К не наблюдается чисто трансляционного пика, аналогичного обнаруженному в [4] на частотах, близких к  $110 \text{ см}^{-1}$ . На данный момент точного объяснения этому нет, но среди возможных причин рассматриваются другие версии возникновения пика на  $110 \text{ см}^{-1}$ . Изотопический сдвиг из-за разности масс воды и тяжелой воды не может вывести этот переход из нашего диапазона измерений, но, возможно, в  $\text{D}_2\text{O}$  он перестает быть видим вследствие сильно отличной спиновой и вращательной структуры.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 23-22-00105. Авторы благодарны Никите Орехову, Vasileios Balos, Gabriela Hoffman, Shamim Alom, Михаилу Белянчикову, Malcolm H. Levitt, Richard J. Whitby за предоставленные образцы и детальные обсуждения результатов.

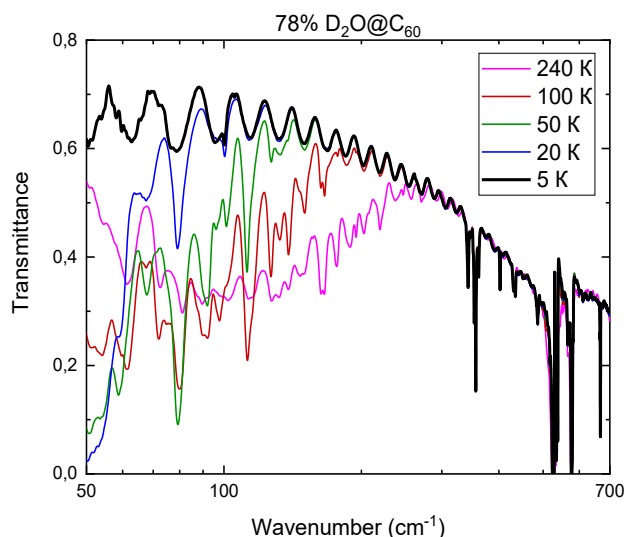


Рис. 2. Инфракрасные спектры пропускания таблетки  $D_2O@C_{60}$  с заполнением молекулами воды 78%. Спектры измерены при различных температурах в интервале от 5 до 240 К

### Литература

1. *Halverson T.* [et al.]. Quantifying entanglement of rotor chains using basis truncation: Application to dipolar endofullerene peapods // *J. Chem. Phys.* 2018. V. 148: 074112.
2. *Pinto D.* [et al.]. Readout and control of an endofullerene electronic spin // *Nat. Commun.* 2020. V. 11: 6405.
3. *Dorn H. C.* [et al.]. Endohedral metallofullerenes: Applications of a new class of carbonaceous nanomaterials // *Nanosci. Nanotechnol.* 2010. Lett. V. 2(2). P. 65–72.
4. *Zhukov S.* [et al.]. Rotational coherence of encapsulated ortho and para water in fullerene- $C_{60}$  revealed by time-domain terahertz spectroscopy // *Sci. Rep.* 2020. V. 10: 18329.
5. *Suzuki H.* [et al.]. Rotational motion and nuclear spin interconversion of  $H_2O$  encapsulated in  $C_{60}$  appearing in the low-temperature heat capacity // *J. Phys. Chem. Lett.* 2019. V. 10(6). P. 1306–1311.
6. *Melentev A.* [et al.]. THz and IR spectroscopy of  $H_2O@C_{60}$  endofullerene // *J. Phys. Conf. Ser.* 2021. V. 1984: 012012. DOI: 10.1088/1742-6596/1984/1/012012.
7. *Krachmalnicoff A.* [et al.]. An optimized scalable synthesis of  $H_2O@C_{60}$  and a new synthesis of  $H_2@C_{60}$  // *Chem. Commun.* 2014. V. 50. P. 13037–13040.

УДК 538.956

### Радиочастотная, терагерцевая и рентгеновская спектроскопия монокристалла $SrTiO_3:Mn$

*М. В. Таланов<sup>1</sup>, А. И. Сташ<sup>2</sup>, С. А. Иванов<sup>3</sup>, Е. С. Жукова<sup>4</sup>, Б. П. Горшун<sup>4</sup>, Б. М. Некрасов<sup>4</sup>,  
В. С. Столяров<sup>4</sup>, В. И. Козлов<sup>5</sup>, М. Савинов<sup>6</sup>, А. А. Буш<sup>5</sup>*

<sup>1</sup>Южный федеральный университет

<sup>2</sup>ИНЭОС им. А. Н. Несмеянова РАН

<sup>3</sup>Московский государственный университет

<sup>4</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>5</sup>МИРЭА

<sup>6</sup>Институт физики, Прага, Чехия

Титанат стронция  $SrTiO_3$  (STO) является классическим примером квантового параэлектрика. Более того, его допирование магнитными элементами, например ионами марганца, раскрывает в нем потенциал квантового мультиферроика. Однако до сих пор существуют разногласия в вопросе о том, как ионы Mn садятся в перовскитную решетку  $ABO_3$  и какое влияние оказывает конкретное их расположение на диэлектрические и магнитные свойства материала. В работе были синтезированы монокристаллы  $SrTi_xMn_{1-x}O_3$  ( $x=2$  ат.%) и спектроскопическими методами изучены их диэлектрические характеристики в радиочастотном и терагерцевом диапазонах длин волн. Нами наблюдалась терагерцевая сегнетоэлектрическая мягкая мода, чей вклад в диэлектрическую проницаемость  $\Delta\epsilon_{SM}$  увеличивается с понижением температуры, выходя на насыщение в согласии с зависимостью Барретта [1]. Измерения показали,

что как качественные, так и количественные характеристики мягкой моды STO : Mn близки к наблюдаемому поведению параметров недопированного монокристалла STO, что свидетельствует о слабом влиянии ионов марганца на поведение мягкой моды. Вместе с тем, используя методы высокоточной рентгеновской дифракции, нам удалось обнаружить признаки занятия ионами Mn позиции, смещенной от центра B-подрешетки перовскитной структуры. Более того, вблизи температуры антиферродисторсного перехода (105–110 К) это положение расщепляется на два энергетически неэквивалентных, что создает условия для локальных перескоков ионов Mn. Мы считаем, что именно эти перескоки ведут к возникновению двух релаксационных пиков, наблюдавшихся нами на частотах ниже 1 МГц в спектрах функции диэлектрических потерь  $\text{tg } \delta$ . Температурное поведение пиков хорошо описывается законом Аррениуса  $\text{tg } \delta = A e^{-\frac{E_a}{k_B T}}$  с активационными энергиями 35 и 42 мэВ и с «попытными» частотами  $1 \cdot 10^{11}$  и  $\sim 1,6 \cdot 10^{10}$  Гц соответственно. Аналогичные релаксационные процессы наблюдались и ранее, но для случаев расположения ионов Mn в A-подрешетке, т. е. в соединениях  $\text{Sr}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}_3$  (см., например, [2]). Насколько нам известно, в нашей работе впервые было зафиксировано смещение ионов Mn из центральной позиции B-подрешетки, что существенно обогащает информацию о природе диэлектрических свойств допированного магнитными ионами титаната стронция и открывает новые возможности для применения этого соединения в электронике.

Работа выполнена при поддержке РФФИ по проектам 21-12-00358, 22-72-10022, 22-13-00122.

### Литература

1. *Talanov M. V.* [et al.]. Octahedra-tilted control of displacement disorder and dielectric relaxation in mn-doped SrTiO<sub>3</sub> single crystals // J. Phys. Chem. Lett. 2022. V. 13: 11720.
2. *Savinov M.* [et al.]. Dielectric properties of Mn doped SrTiO<sub>3</sub> // J. Phys.: Condens. Matter. 2008. V. 20: 095221.

УДК 535.211:544.032.65

## Наносекундная лазерная обработка алюминитридной керамики для применения в микроэлектронике

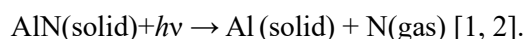
*А. А. Свиридова, А. С. Щекин*

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

В данной работе представлено исследование влияния параметров лазерной обработки импульсного наносекундного лазерного излучения на степень металлизации и качество поверхности алюминитридной керамики. Были проведены опыты по созданию структур с наименьшим сопротивлением, получены и проанализированы зависимости сопротивления, толщины проводящего слоя и шероховатости поверхности от перекрытия импульсов средней мощности излучения в воздухе и аргоне; показано наличие оптимальных значений перекрытий импульсов по *Oy* (направление сканирования) и *Ox* (направление шага), соответствующих наименьшему значению сопротивления.

Техническая керамика AlN является незаменимым материалом подложки для электротехнических изделий, для чего керамику подвергают металлизации. Технология металлизации диэлектрических материалов в основном формируется на гальванических процессах, которые состоят из сложных, многостадийных процессов, затрачивающих большое количество ресурсов. Лазерная обработка является эффективным способом металлизации [1]. Этот способ обработки характеризуется высокой точностью и управляемостью процесса, позволяет усовершенствовать механические и электрические свойства материала, создает условия для нанесения меди на печатные платы за счет гальванического меднения, что позволяет результативно решить актуальную проблему ускорения и упрощения процесса создания продуктов микроэлектроники.

Керамика на основе нитрида алюминия отличается высокими электроизоляционными свойствами и теплопроводностью. Металлизация керамики происходит за счет реакции разложения в результате воздействия лазерного излучения на поверхность непроводящего нитрида алюминия:



Цель данной работы — исследование влияния параметров лазерной обработки импульсного лазерного излучения с длиной волны  $\lambda = 1,064$  мкм на качество и степень металлизации поверхности керамики

ческой подложки AlN путем исследования структуры поверхности и измерения толщины проводящего слоя.

Для изучения влияния параметров лазерного излучения на процесс металлизации была получена зависимость сопротивления от длительности импульсов, исходя из которой были выбраны длительности импульса 4 нс и 200 нс, соответствующие наибольшему и наименьшему значению сопротивления и представляющие интерес для анализа. Плотность энергии как параметр частоты выбиралась максимально возможной для наибольшего воздействия на керамическую подложку, средняя мощность излучения в эксперименте менялась. Вследствие высокой химической активности чистого алюминия с кислородом, что приводит к образованию оксидов ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), отрицательно влияющих на проводимость структур, процесс лазерной металлизации проводился в двух средах: аргоне и воздухе.

Осуществляя подбор параметров лазерного излучения, можно добиться желаемых параметров проводящего слоя с контролем толщины слоя, сопротивления и качества поверхности.

### Литература

1. *Kozioł P. E.* [et al.]. Conductive aluminum line formation on aluminum nitride surface by infrared nanosecond laser // *Appl. Surf. Sci.* 2013. V. 287. P. 165–171.
2. *Yang Q.* [et al.]. Nanosecond laser surface processing of AlN ceramics // *J. Mater. Sci.* 2019. V. 54(22). P. 13874–13882.

# Секция физики высоких плотностей энергии

Председатель: О. Ф. Петров (д. ф.-м. н., академик РАН, профессор)

Зам. председателя: К. Г. Косс (к. ф.-м. н.)

Секретарь: Д. В. Сазонова

Дата: 06.04.2023

Время: 10:00

УДК 537.528

## Развитие импульсного разряда по тепловому механизму в проводящей воде под действием ультразвука

*А. А. Филаткин<sup>1,2</sup>, В. А. Панов<sup>2</sup>, В. Я. Печёркин<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

На сегодняшний день большое внимание уделяется очистке водных растворов от различных загрязнений [1]. Слабые акустические колебания приводят к коагуляции газовых пузырьков в жидкости. Ударные волны, возникающие в жидкости при схлопывании кавитационных пузырьков под ультразвуковым воздействием, способны дробить частицы примесей и разрывать оболочки клеток микроорганизмов, приводя к их дальнейшей гибели [2–4]. Дополнительное применение электрического разряда интенсифицирует генерацию ударных волн и заряженных частиц для обработки растворов.

В данной работе было проведено исследование влияния ультразвуковых волн на возникновение пробоя неоднородным электрическим полем в проводящей воде, инициированного коротким импульсом напряжения величиной до 12 кВ и длительностью 8,5 мс. В этих условиях пробой развивается по тепловому механизму, одним из этапов которого является взрывное вскипание перегретой жидкости вблизи анода [5]. Облучение ультразвуком в бескавитационном режиме способствует процессу вскипания [6], а значит, может увеличивать вероятность наступления пробоя, уменьшая время распространения плазменного канала до замыкания разрядного промежутка.

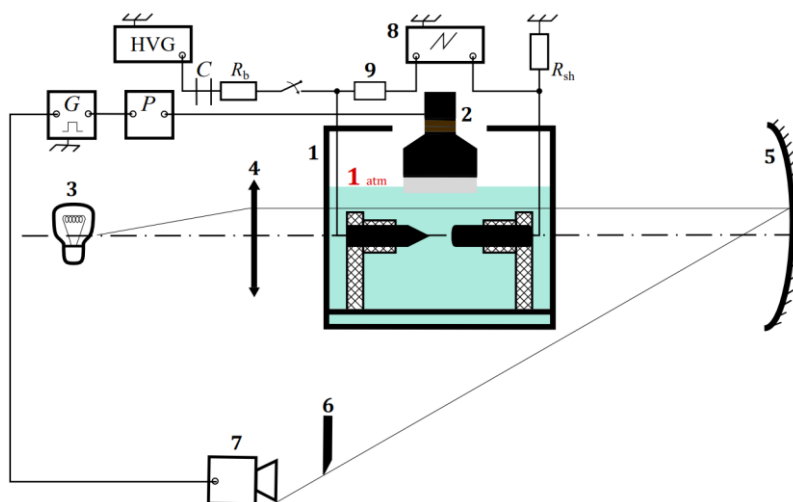


Рис. 1. Схема установки: 1 — разрядная ячейка; 2 — ультразвуковой излучатель; 3 — светодиод; 4 — длиннофокусная собирающая линза; 5 — сферическое зеркало; 6 — нож Фуко; 7 — высокоскоростная камера Phantom V2012; 8 — четырехканальный осциллограф LeCroy HDO4054; 9 — пассивный высоковольтный пробник напряжения Tektronix P6015A; HVG — высоковольтный источник питания Spellman;  $R_b$  — балластное сопротивление,  $R_{sh}$  — шунт;  $G$  — универсальный генератор сигналов RIGOL DG4102;  $P$  — усилитель сигналов Power Amplifier Type 2713 компании Brüel & Kjær: сплошной голубой — вода, штриховка — диэлектрические держатели электродов

Экспериментальная установка приведена на рис. 1. Основными составляющими являются цилиндрическая разрядная ячейка 1, наполненная водой с электропроводностью от 255 до 275 мкСм/см. Внутри ячейки расположены анод-острие и катод-штырь. Длина промежутка между электродами составляет 7,8 мм. Ультразвуковой излучатель 2 погружен в воду диэлектрической поверхностью.

Наблюдение стоячей звуковой волны и разрядного промежутка проводилось скоростной фотокамерой шлирен-методом. Детальная картина регистрировалась с использованием микроскопа.

По результатам серий экспериментов был обнаружен рост вероятности пробоя на пороговых напряжениях, при которых еще может возникнуть разряд, в сравнении с вероятностью пробоя при тех же условиях в отсутствие ультразвука.

### Литература

1. Викулина В. Б., Викулин П. Д. Очистка воды коагуляцией под действием ультразвукового поля // Строительство: наука и образование. 2016. № 1. С. 31–36.
2. Агранат Б. А. Ультразвуковая технология. — М.: Металлургия, 1974.
3. Golykh R. N. Theoretical and experimental study of cavitation dispersing in “liquid-solid” system for revelation of optimum influence modes // Am. J. Eng. Res. 2016. V. 11. P. 159–168.
4. Golykh R. N. Evaluation of optimum modes and conditions of cavitation and acoustic absorption intensification for increasing efficiency of gas mixtures separation // J. Appl. Fluid Mech. 2017. V. 10(5). P. 1235–1246.
5. Panov V. A., Vasilyak L. M., Vetchinin S. P., Pecherkin V. Ya., Son E. E. Pulsed electrical discharge in conductive solution // J. Phys. D: Appl. Phys. 2016. V. 49(38): 385202.
6. Перминов С. А., Ермаков Г. В. Вскипание перегретой воды и водных растворов под действием ультразвука // Теплофизика и аэромеханика. 2010. Т. 17. № 1. С. 119–125.

УДК 537.52

### Трехмерное моделирование электрического разряда постоянного тока в сверхзвуковом потоке воздуха

Д. А. Тарасов<sup>1,2</sup>, А. А. Фирсов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Использование электрических разрядов в высокоскоростных потоках является активно развивающейся областью исследований [1]. Существуют разные виды электрических разрядов, что предоставляет большую вариативность исследуемых конфигураций в работах, посвященных этой области. В данной работе исследовался продольно-поперечный дуговой разряд в пристеночной области сверхзвукового течения. Одним из применений такого разряда является воспламенение топливовоздушных смесей и стабилизации их горения. Для моделирования разряда была выбрана одножидкостная (МГД) модель равновесной плазмы. Такой выбор обусловлен большими пространственными (длина разряда может достигать 10 см) и временными (порядка нескольких миллисекунд) масштабами. Для расчетов использовался программный комплекс FlowVision. Моделирование течения осуществляется посредством решения трехмерной нестационарной системы уравнений Навье–Стокса с использованием модифицированной модели турбулентности  $k-\epsilon$  FlowVision. Более подробное описание используемых в модели уравнений можно найти в статье [2], в которой авторы использовали аналогичный подход для моделирования продольного дугового разряда в осесимметричной постановке.

В качестве расчетной области использовался прямоугольный параллелепипед с размерами 100×31×37 мм, содержащий в себе цилиндрические электроды диаметром 1,5 мм. Электроды расположены в стенке, не выступая из нее. Расстояние между ними — 4 мм. Выход из расчетной 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, число Маха в ядре потока  $M = 2$ . Для определения профиля скорости с учетом пограничного слоя был проведен предварительный расчет для тонкого двумерного слоя воздуха в параллелепипеде длиной 200 мм, что соответствовало геометрии экспериментальной установки. Целью моделирования было получение трехмерных распределений температуры и плотности тока в процессе эволюции разряда в потоке. Визуализация полученных результатов показана на рис. 1.

Неотъемлемой частью эволюции продольно-поперечного разряда является процесс перепробоя, в результате которого между продольными участками канала возникает новая перемычка. На рис. 1 на 176 мкс для иллюстрации этого процесса вручную был создан новый поперечный участок канала. Без добавления механизма образования такой перемычки к нашей МГД-модели невозможно корректно описать эволюцию разряда во времени, так как он будет удлиняться, пока не выйдет за границу расчетной области. На определении механизма перепробоя и было сосредоточено внимание.

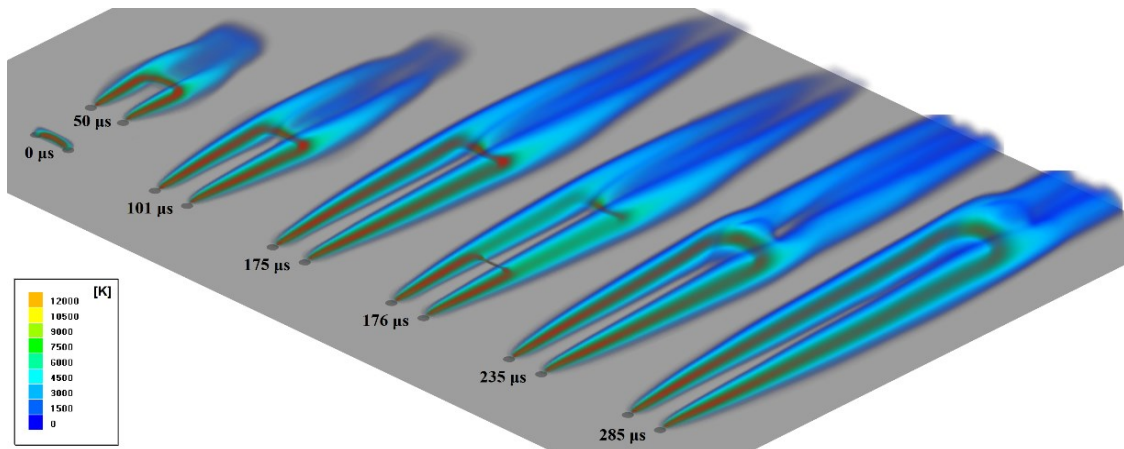


Рис. 1. Эволюция электрического разряда во времени. Показано трехмерное распределение температуры с наложенным поверх распределением тока (красным цветом)

В полученном расчете напряжение на разряде максимально возможной длины (80 мм) составляет около 1 кВ, эти параметры являются недостаточными для возникновения перепробоя. Поэтому для получения необходимых значений напряжения на разряде при сохранении количества расчетных ячеек на разумном уровне было принято решение уменьшить ток разряда до 1 А. Кроме того, в реальном течении присутствуют сильные возмущения, приводящие к искривлению токового канала и существенным изменениям в приведенном электрическом поле. С целью имитировать подобное поведение реального разряда в моделировании был добавлен объемный источник силы, действовавший в небольшом параллелепипеде размером  $4 \times 2 \times 2$  мм в течение 64 мкс и направленный в сторону второй ветви токового канала. В результате продольные участки токового канала сблизались (см. рис. 2), что создало благоприятные условия для возникновения новой перемычки.

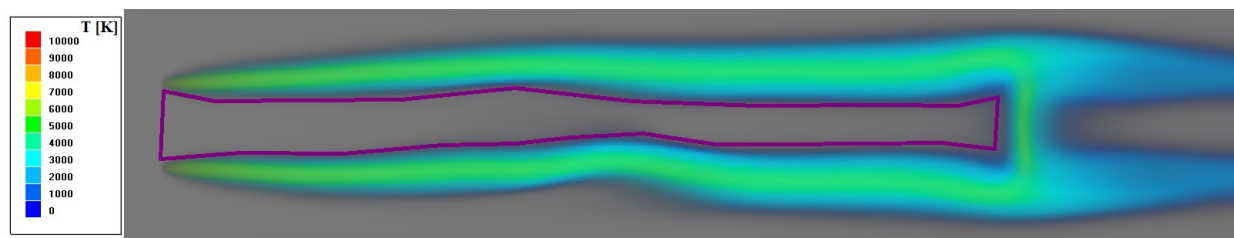


Рис. 2. Деформация канала электрического разряда объемной силой. Показано трехмерное распределение температуры

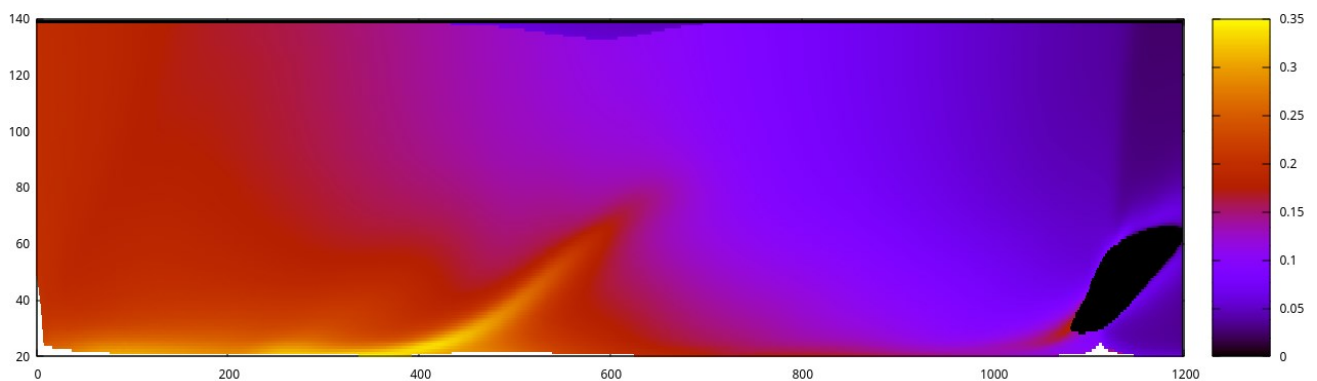


Рис. 3. Интеграл модуля приведенного электрического поля вдоль линии напряженности электрического поля. По оси абсцисс — координата вдоль потока, по оси ординат — расстояние от стенки

В качестве численного критерия потенциального места перепробоя было предложено рассматривать интеграл модуля приведенного электрического поля вдоль линии напряженности электрического поля. При этом интегрирование производилось только в промежутке между каналами электрического разряда (обозначено фиолетовым на рис. 2). На рис. 3 представлена визуализация полученной величины, а наиболее вероятным местом образования нового канала является точка с максимальным значением интеграла.

Работа выполняется при поддержке гранта РФФИ № 21-79-10408.

### Литература

1. *Leonov S. B.* Electrically Driven Supersonic Combustion // *Energies*. 2018. V. 11(7):1733.
2. *Firsov A., Bityurin V., Tarasov D., Dobrovolskaya A., Troshkin R., Bocharov A.* Longitudinal DC discharge in a supersonic flow: numerical simulation and experiment // *Energies (Basel)*. 2022. V. 15: 7015. DOI: 10.3390/en15197015.

УДК 533.9.082

## Проблема определения температуры разряда постоянного тока в сверхзвуковом потоке воздуха

*Р. С. Трошкин, А. А. Фирсов*

Объединенный институт высоких температур РАН

Взаимодействие сверхзвукового потока с разрядом постоянного тока изучается на протяжении длительного времени, первые исследования в данном направлении были выполнены в 1960-х гг. [1]. На базе выявленных свойств взаимодействия электрических разрядов разных типов с потоком газа исследования имеют преимущественно прикладной характер и делятся на 1) плазменную аэродинамику и управление потоком [2, 3] и 2) плазменно-стимулированное горение [4]. Фундаментальные исследования разряда постоянного тока проводились одновременно несколькими научными группами с целью установления параметров разряда, его динамики и влияния на скоростной воздушный поток [5, 6]. Во всех работах, как правило, рассматривался продольно-поперечный разряд, однако его длина изменяется во времени, что приводит к пульсации параметров. Для фундаментального исследования такой объект не очень удобен, и ряд свойств проще установить для продольного разряда.

Для получения подробного описания локальных характеристик разряда постоянного тока и течения газа вблизи разряда была выбрана осесимметричная конфигурация эксперимента, препятствующая появлению поперечного потока (и сноса потока) участка токового канала. Постановка эксперимента была реализована в импульсной сверхзвуковой аэродинамической трубе ИАДТ-50 ОИВТ РАН. Разряд зажигался в ядре сверхзвукового потока (т. е. вдали от стенок) между тонкими коаксиальными электродами, расположенными параллельно потоку, с расстоянием между концами электродов 30 мм. Питание разряда подводилось от источника постоянного напряжения 5 кВ через балластное сопротивление, регулирующее разрядный ток в пределах 0,5–7 А. В рассматриваемой конфигурации были использованы два электрода — передний вольфрамовый электрод и задний медный. Также для зажигания использовался третий иницирующий электрод, который был изогнут и предназначался для начального пробоя. Таким образом, разряд, который сначала зажигался в виде петли, сносился потоком, а затем, достигнув нижнего по потоку электрода, переходил в продольную форму. Геометрия третьего электрода выполнялась таким образом, чтобы влияние косоугольного скачка уплотнения, падающего от электрода на область разряда, было минимальным. Электрическая схема и базовая конфигурация электродов показаны на рис. 1.

В ходе экспериментов проводилась скоростная съемка разряда на камеру Photron S9 с выдержкой 1–2 мкс, особенности течения регистрировались с помощью теневой системы высокого разрешения с выдержкой 100 нс (экспозиция определяется длительностью импульса подсветки). Спектры оптического излучения разряда получали в диапазоне 287–367 нм с помощью спектрографа на базе монохроматора Ortel MS 257 (решетка 1800 штр./мм) и ПЗС-камеры Andor DU420. Вращательную и колебательную температуру электроразрядной плазмы определяли путем сравнения спектров второй положительной системы азота с модельными спектрами той же системы, полученными с помощью программы Spesair. Температура газа приравнивалась к найденной вращательной температуре основного электронного состояния.

В результате проведенных исследований экспериментально были получены характеристики продольного разряда постоянного тока в сверхзвуковом потоке воздуха. Получена ВАХ разряда, которая



хорошо согласуется с результатами моделирования [7]. С помощью эмиссионной спектроскопии была определена температура электроразрядной плазмы. Температура плазмы была получена в трех точках вдоль разрядной нити при различном токе разряда. Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы: температура разряда падает вдоль разряда; с увеличением тока разряда температура растет медленно из-за процесса диссоциации азота; получена оценка температуры в разряде, которая составила 4000–7000 К в зависимости от тока разряда. Также было проведено сравнение полученной зависимости температуры от тока с результатами численного моделирования [7] в CFD-пакете Plasmaero (см. рис. 2). В качестве результата моделирования используется максимальная температура для данного участка разряда. Считается, что температура плазмы, измеренная эмиссионной спектроскопией, соответствует максимальной температуре разряда. Однако, как показано на рис. 2, было зафиксировано значительное отличие измеренной и определенной в моделировании температур. Было сделано предположение, что для разрядов, имеющих форму шнура и существенную радиальную неоднородность температуры, необходимо учитывать радиальный профиль, т. е. температура, полученная экспериментально, является интегральной (усредненной) вдоль линии наблюдения. Зная распределение температуры газа по радиусу в разряде из моделирования разряда в Plasmaero [7], был смоделирован интегральный спектр как сумма спектров, построенных для каждой точки вдоль радиуса с шагом 0,1 мм. По данному интегральному спектру была определена температура тем же способом, как для экспериментального: путем сравнения с эталонным спектром с известной температурой. Сравнение экспериментальной температуры с температурой, полученной в результате обработки смоделированного интегрального спектра, показана на рис. 2. Видно, что экспериментальные данные имеют хорошее численное совпадение с моделированием с учетом радиального распределения температуры. Также с помощью проведенной высокоскоростной съемки и обработки полученных данных, было установлено, что толщина токового канала увеличивается с ростом тока разряда, количественная оценка толщины токового канала в зависимости от тока составила 1,2–1,8 мм. По результатам обработки теневой визуализации разряда в потоке было получено, что тепловой конус увеличивается вдоль разряда; получена количественная оценка толщины теплового конуса, которая составила от 3 до 5,5 мм в точке 25 мм от переднего электрода при изменении тока. Полученные значения толщин токового канала и теплового конуса количественно хорошо совпадают с результатами численного моделирования. Результаты данной работы подробно изложены в [8].

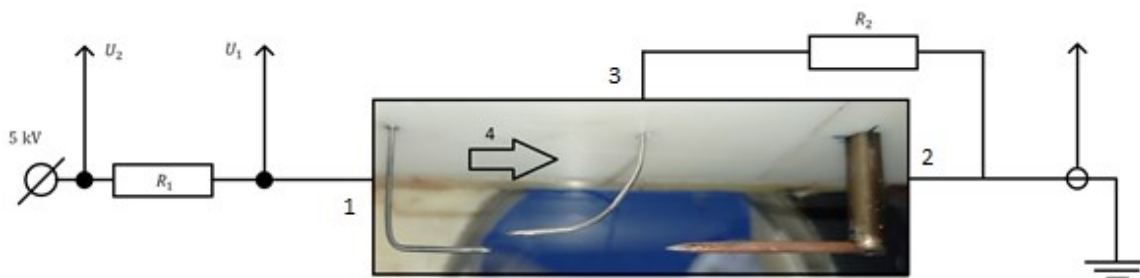


Рис. 1. Электрическая схема и базовая конфигурация электродов: 1 — передний электрод; 2 — задний электрод; 3 — инициирующий электрод; 4 — сверхзвуковой поток

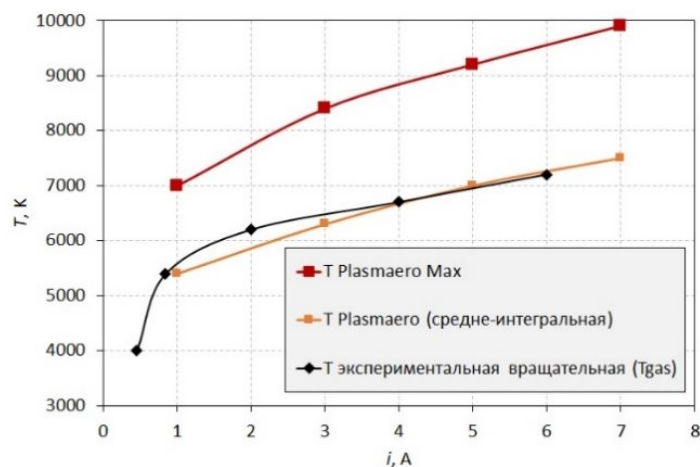


Рис. 2. Сравнение экспериментальных и рассчитанных CFD методом зависимостей температуры от тока

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 21-79-10408.

## Литература

1. *Alferov V. I., Bushmin A. S.* Electrical Discharge in a Supersonic Air Flow. // Soviet Physics JETP 1963. V. 17. P. 1190–1194.
2. *Caruana D.* Plasmas for aerodynamic control // Plasma Phys. Controlled Fusion. 2010. V. 52: 124045. DOI: 10.1088/0741-3335/52/12/124045.
3. *Poggie J., McLaughli T., Leonov S.* Plasma aerodynamics: current status and future directions // Aerospace-Lab Journal. 2015. AL10-01. DOI: 10.12762/2015.AL10-01.
4. *Leonov S.* Electrically driven supersonic combustion // Energies (Basel). 2018. V. 11: 1733. DOI: 10.3390/en11071733.
5. *Shibkov V. M., Shibkova L. V., Logunov A. A.* Parameters of the plasma of a dc pulsating discharge in a supersonic air flow // Plasma Phys. Rep. 2017. V. 43. P. 373–380. DOI: 10.1134/S1063780X17030114.
6. *Efimov A. V., Firsov A. A., Kolosov N. S., Leonov S. B.* Characterization of electric discharge collocated with gas jet in supersonic airflow // Plasma Sources Sci. Technol. 2020. V. 29: 07LT01. DOI: 10.1088/1361-6595/ab9c94.
7. *Firsov A., Bityurin V., Tarasov D., Dobrovolskaya A., Troshkin R., Bocharov A.* Longitudinal DC discharge in a supersonic flow: numerical simulation and experiment // Energies (Basel). 2022. V. 15: 7015. DOI: 10.3390/en15197015.
8. *Troshkin R. S., Firsov A. A.* Parameters of a longitudinal DC discharge in a supersonic air flow // Plasma Phys. Rep. 2023. V. 49(5). P. 640–648.

УДК 533.9

### Численное моделирование ограниченной однокомпонентной системы в условиях сильной неидеальности

*Е. С. Шпилько<sup>1,2</sup>, Д. И. Жуховицкий<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

В работе было проведено моделирование методом молекулярной динамики однокомпонентных плазменных кластеров. Рассматриваемые объекты состоят из системы массивных заряженных частиц на равномерно распределенном компенсирующем фоне заряда противоположного знака, ограниченного сферической поверхностью. В отличие от бесконечной системы [1], состояние системы определяется не только параметром кулоновской неидеальности  $\Gamma = Z^2 e^2 / r_d T$  ( $r_d = (3n_d / 4\pi)^{1/3}$ ,  $n_d$  — концентрация частиц,  $Ze$  — заряд частицы), но и размером кластера — количеством частиц  $N$  в нем. Температура объекта при моделировании контролировалась с помощью термостата Ланжевена, модифицированного для сохранения полного импульса. Это позволяет исключить поверхностные дипольные колебания, которые могут влиять на процесс кристаллизации кластера. Моделирование производилось для  $N$  в диапазоне 150–1200 и  $\Gamma$  в диапазоне от 10 до 500. В работе обсуждаются методы экспериментального определения кулоновского параметра неидеальности на основе модели ячеек Вигнера–Зейтца. Показано, что оценка  $\Gamma$  по среднеквадратичному отклонению частицы от центра ее ячейки  $\delta r$ ,  $\Gamma \simeq \Gamma_1 = 3r_d^2 / \delta r^2$ , не дает точных результатов из-за смещения центра ячейки вследствие частых тепловых прыжков частицы (большого коэффициента самодиффузии) (рис. 1). Предложен новый метод, исключающий вычисление среднеквадратичного отклонения частиц и использующий скорость и ускорение частиц. Показано, что оценка

$$\Gamma \simeq \Gamma_2 = \frac{3r_d^2}{\langle v^2 \rangle^2} \left[ \langle a^2 \rangle + \gamma \left( \gamma - \frac{2}{\tau_{st}} \right) \langle v^2 \rangle \right],$$

где  $v$ ,  $a$  — соответственно скорость и ускорение частицы,  $\tau_{st}$  — время распада автокорреляций стохастической силы,  $\gamma$  — коэффициент трения, обеспечивает достаточно высокую точность результатов как для жидкого, так и для кристаллического состояния кластера (рис. 2). На рис. 1 и рис. 2 показаны результаты численного определения кулоновского параметра неидеальности при усреднении по ансамблям, состоящим из центральной частицы, частиц ядра кластера (ядро кластера-частицы, находящиеся внутри сферы радиуса  $2/3R$ , где  $R = N^{1/3}r_d$ ) и всех частиц системы, и сравнения с параметром  $\Gamma$ , задаваемым при моделировании.

Было проведено изучение структуры кластера и процесса кристаллизации системы, которая представляет собой набор вложенных сферических оболочек. Рассмотрен процесс кристаллизации кластера при различном количестве частиц  $N$ . Для определения  $\Gamma$ , при котором происходит переход кластера в кристаллическое состояние, было предложено несколько методов: с помощью корреляционной функции, радиальной функции распределения (рис. 3), среднего значения минимального угла между частицей и ее

шестью соседями в данной оболочке  $\alpha$  (рис. 4), среднего расстояния до центра кластера центральной частицы системы. Для  $N > 300$  обнаружена универсальность двумерного плавления в оболочках, заключающаяся в слабой зависимости порога плавления и формы кривых от  $N$ .

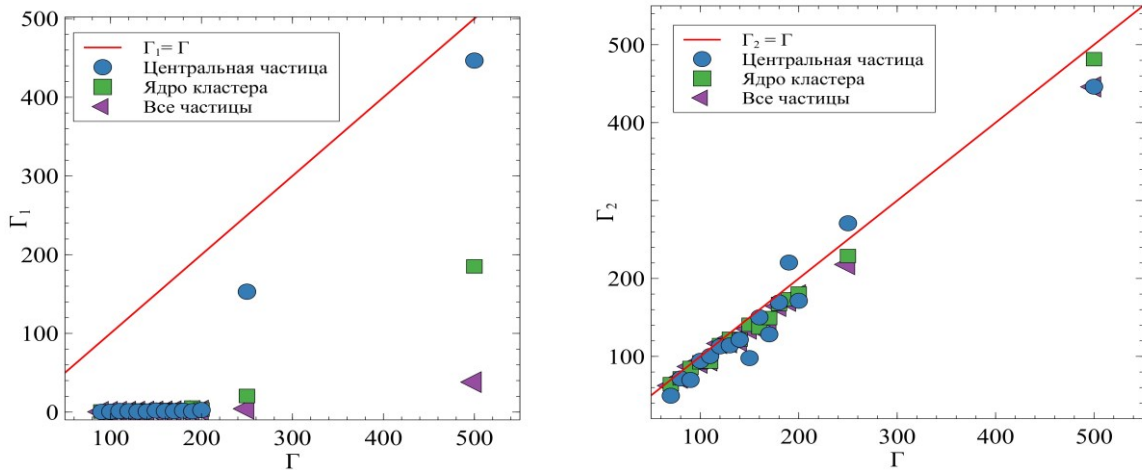


Рис. 1. Параметр неидеальности  $\Gamma_1$ , вычисленный по среднеквадратичному отклонению. Точки — численное моделирование для различных ансамблей частиц (см. легенду), линия —  $\Gamma_1 = \Gamma$

Рис. 2. Параметр неидеальности  $\Gamma_2$ , вычисленный по скорости и ускорению. Точки — численное моделирование для различных ансамблей частиц (см. легенду), линия —  $\Gamma_2 = \Gamma$

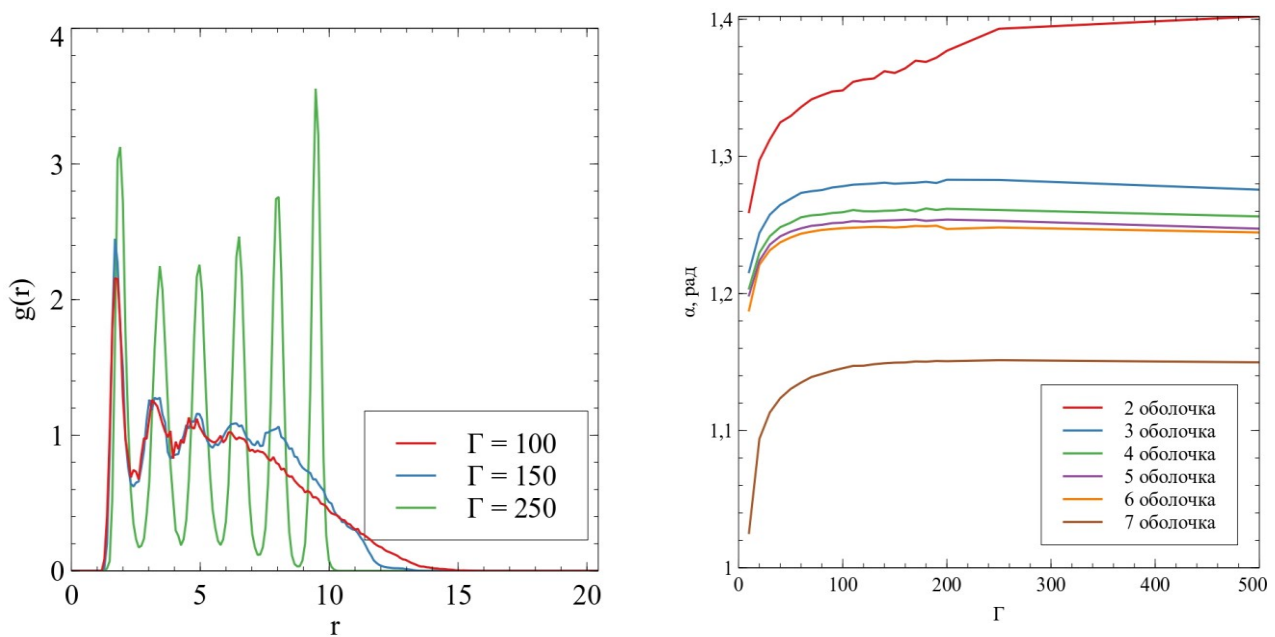


Рис. 3. Радиальная функция распределения для кластера при  $N = 1075$  для различных  $\Gamma$  (см. легенду)

Рис. 4. Зависимость среднего значения минимального угла между соседями на сферической оболочке  $\alpha$  от параметра  $\Gamma$  при  $N = 1075$  для различных оболочек (см. легенду)

### Литература

1. Hamaguchi S., Farouki R.T., Dubin D. H. E. Triple point of Yukawa systems // Phys. Rev. E. 1997. V. 56(4). P. 4671–4682.
2. Zhukhovitskii D. I., Naumkin V. N., Khusnulgatin A. I., Molotkov V. I., Lipaev A. M. Dust coupling parameter of radio-frequency-discharge complex plasma under microgravity conditions // Phys. Rev. E. 2017. V. 96(4): 043204.
3. Arp O., Block D., Bonitz M., Fehske H., Golubnychiy V., Kosse S., Ludwig P., Melzer A., Piel A. 3D Coulomb balls: Experiment and simulation // J. Phys. Conf. Ser. 2005. V. 11: 234–247.

## **Железо: термодинамические, транспортные и оптические свойства из *ab initio* расчетов**

**И. С. Гальцов<sup>1,2</sup>, В. Б. Фокин<sup>1,2</sup>, А. В. Дороватовский<sup>2</sup>, Д. В. Минаков<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Железо является широко распространенным компонентом различных конструкционных материалов, которые подвергаются интенсивным термическим и механическим нагрузкам. В связи с этим большую значимость представляет получение надежных данных как об уравнении состояния железа, так и о его транспортных и оптических свойствах. Тем не менее на сегодняшний день существует множество противоречивых данных о теплофизических свойствах железа, в особенности в жидкой фазе. Так, у разных авторов существенно отличаются экспериментальные значения плотности железа в точке плавления и наклон кривой теплового расширения, а также величина его удельного сопротивления в жидком состоянии [1–3].

В данной работе представлены результаты исследования теплофизических свойств железа на основе расчетов методом квантовой молекулярной динамики. Отдельное внимание уделено необходимости учета спиновой поляризации для более корректного описания свойств железа при проведении первопринципных расчетов. Восстановлены кривая теплового расширения железа и температурная зависимость энтальпии как с учетом, так и без учета спиновой поляризации. Приведено сравнение с экспериментальными данными, в том числе полученными из эксперимента по импульсному нагреву, проведенного экспериментальной группой в рамках текущей работы. Продемонстрировано, что учет спиновой поляризации позволяет заметно лучше описать указанные свойства. При этом показано, что результаты расчетов для энтальпии существенным образом зависят от типа кристаллической решетки: для ОЦК железа наиболее затруднено описание в  $\delta$ -фазе даже с учетом спина, в то время как для ГЦК железа ( $\gamma$ -фаза) хорошее согласие с экспериментом наблюдается только в спин-поляризованных расчетах.

Также из *ab initio* расчетов найдены удельное сопротивление и нормальная спектральная излучательная способность твердого и жидкого железа. Эти данные получены с использованием формулы Кубо–Гринвуда и преобразования Крамерса–Кронига.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-79-10398).

### **Литература**

1. *Hixson R. S., Winkler M. A., Hodgdon M. L.* Sound speed and thermophysical properties of liquid iron and nickel // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 42. P. 6485–6491.
2. *Beutl M., Pottlacher G., Jager H.* Thermophysical properties of liquid iron // *Int. J. Thermophys.* 1994. V. 15. P. 1323–1331.
3. *Seydel U., Fucke W.* Sub-microsecond pulse heating measurements of high temperature electrical resistivity of the 3d-transition metals Fe, Co, and Ni // *Zeitschrift für Naturforschung A.* 1977. V. 32. P. 994–1002.

## **Методика анализа перемежаемости в трехмерном пограничном слое по данным PIV-измерений**

**А. А. Абдуллаев<sup>1,2</sup>, А. Я. Котвицкий<sup>2</sup>, И. А. Моралев<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

В аэродинамике летательных аппаратов одной из ключевых инженерных задач является управление ламинарно-турбулентным переходом. Практическая значимость решения этой задачи состоит в затягивании перехода, что приведет к уменьшению расхода топлива летательных аппаратов ввиду снижения турбулентного трения. На стреловидном крыле в трехмерном пограничном слое возникает неустойчивость поперечного течения [1–3]. Данная неустойчивость проявляется в виде стационарных и бегущих вихрей. Стационарные возникают при обтекании потоком шероховатости на поверхности крыла, а

бегущие порождаются турбулентностью набегающего потока. Именно нарастание амплитуды неустойчивости поперечного течения приводит к ламинарно-турбулентному переходу на стреловидном крыле. В условиях крейсерского полета переход вызывается стационарной модой.

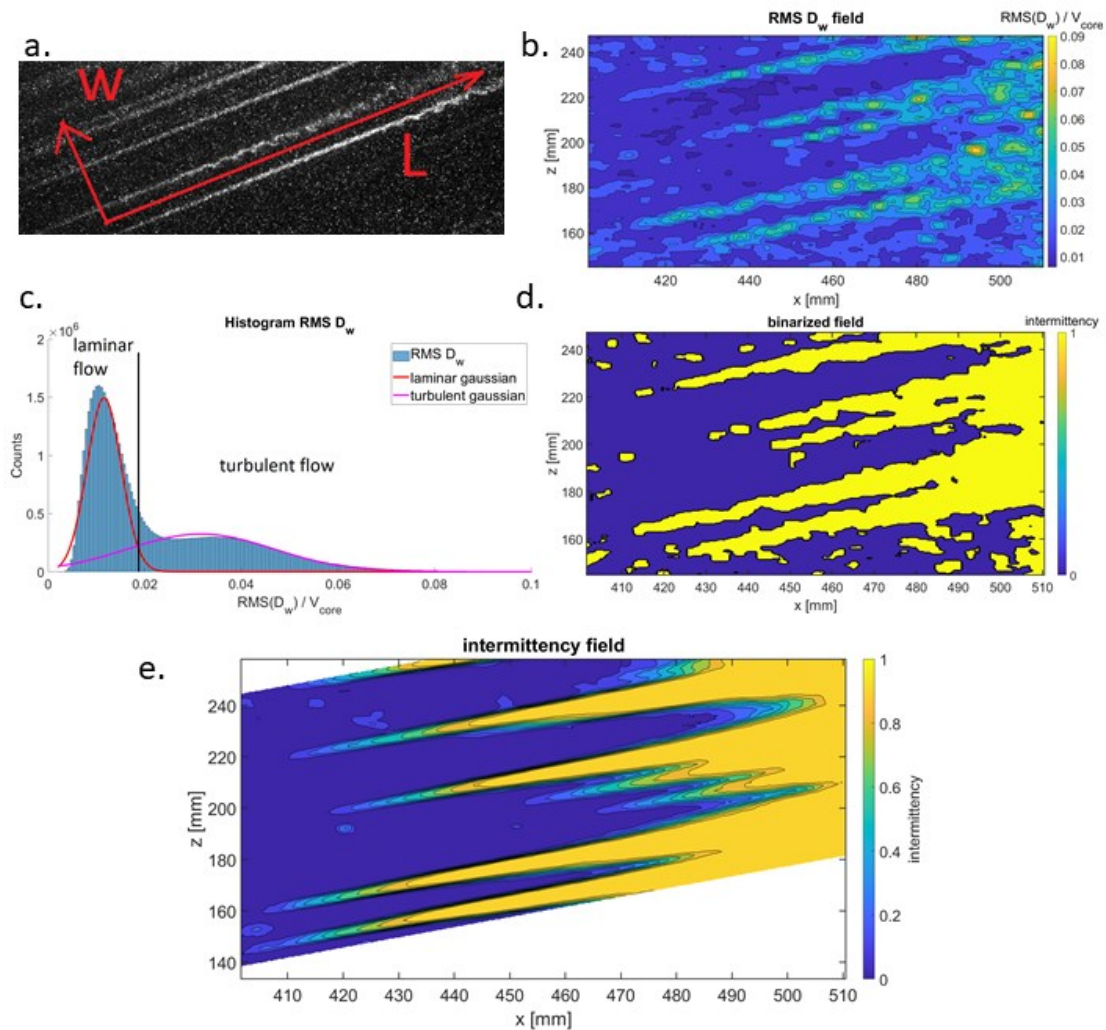


Рис. 1. Визуализация методики расчета перемежаемости: *a* — вторичная неустойчивость; *b* — производная поперечной компоненты скорости вдоль вихря; *c* — модель двух гауссианов; *d* — бинарное поле перемежаемости; *e* — поле перемежаемости

Одним из перспективных методов управления переходом является метод противофазного подавления возмущений [3]. При этом искусственные возмущения могут возбуждаться различными способами. В данной работе исследовалась возможность управления переходом с помощью плазменного актуатора, который вносил в пограничный слой дополнительные возмущения. Ламинарно-турбулентный переход является стохастическим процессом: в определенной точке пространства могут попеременно наблюдаться ламинарные и турбулентные режимы течения. Этот процесс характеризуется с помощью перемежаемости. Перемежаемость характеризует отношение длительности турбулентного режима течения ко всему времени измерений. Для оценки эффективности управления переходом была разработана методика расчета перемежаемости по экспериментальным данным, полученным методом цифровой трассерной визуализации частиц (PIV).

Эксперимент проводился на стреловидной модели с углом стреловидности  $40^\circ$  в условиях модельного течения при скорости набегающего потока в 25 м/с. Для создания трехмерного пограничного слоя на плоскую пластину наводился градиент давления с помощью тела вытеснения. Течение исследовалось панорамным методом цифровой трассерной визуализации частиц. С помощью одиночной шероховатости, находящейся на расстоянии 70 мм от передней кромки, возбуждался пакет вихрей поперечной неустойчивости, который имитировал естественное возмущение. Также с помощью плазменного актуатора, находящегося на расстоянии 210 мм от передней кромки, инициировался одиночный барьерный разряд, который генерировал пакет искусственных возмущений. Расположение шероховатости и разряда было таково, что их пакеты не взаимодействовали друг с другом. Было выполнено исследование нарастания

возмущений и их формы. Разряд исследовался при разных питающих напряжениях. Также был исследован одиночный импульс от разряда. Полученные данные были использованы для моделирования затягивания перехода с помощью многоканального актуатора.

Вторая часть работы посвящена методике расчета перемежаемости. Нарастание амплитуды вихря поперечной неустойчивости приводит к возникновению высокочастотной вторичной неустойчивости, которая вызывает распад первичного вихря и переход к турбулентности. В основе методики расчета перемежаемости лежит принцип детектирования областей возникновения вторичной неустойчивости [4]. Определяется критерий бинаризации мгновенного поля на ламинарную и турбулентную область. Осреднение набора последовательных бинарных кадров позволяет получить пространственное распределение перемежаемости. Методика расчета перемежаемости продемонстрирована на рис. 1. С помощью разработанной методики исследованы поля перемежаемости для разных режимов течения: гладкая пластина, повышенная турбулентность, искусственная шероховатость, барьерный разряд от плазменного актуатора.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 20-79-10372.

## Литература

1. *Reed H. L., Kerschen E. J.* Boundary-layer receptivity to freestream disturbances // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 2002. V. 34. P. 291–319.
2. *Saric W. S., Reed H. L. B.* Stability and transition of three-dimensional boundary layers // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 2003. V. 35(1). P. 413–440.
3. *Устинов М. В.* Ламинарно-турбулентный переход в пограничном слое (обзор) // *Ученые записки ЦАГИ.* 2013. Т. 44. № 1. С. 3–43.
4. *Dellacasagrande M.* [et al.]. A procedure for computing the spot production rate in transitional boundary layers // *Exp. Fluids.* 2022. V. 63(8): 136.

УДК 532.5.011

## Расчет динамики активных частиц во внешних силовых полях

*А. Н. Беляев<sup>1</sup>, А. Д. Киверин<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана  
(национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

С применением детальных вычислительных экспериментов проведено исследование двухфазных течений, формируемых при движении активных микрочастиц в среде в случае движения активных частиц во внешних силовых полях. Вычисления выполнялись в декартовой системе координат при помощи модели, основанной на полной системе уравнений Навье–Стокса для вязкой среды в приближении слабой сжимаемости [1]. Перенос частиц описывался с помощью лагранжевой модели, что позволило отследить динамику индивидуальных частиц и провести ее статистический анализ. Модель межфазного взаимодействия учитывала взаимный обмен энергией и импульсом между частицами и несущей средой. Коэффициент сопротивления сферической микрочастицы соответствует модели Шиллера–Наумана [2].

Вычисления проводились в двумерной постановке, в рамках которой расчетная область представляет собой закрытый канал заданных размеров, заполненный покоящимся воздухом при нормальных условиях. Для частиц использовались граничные условия упругого отталкивания от стенок канала, а для газа — условия непротекания. Частицы были равномерно распределены в прямоугольной области со сторонами 12,8×6,4 мм, и под действием вынуждающей силы диффундировали в свободную от частиц область пространства. Помимо динамического действия со стороны силового поля, на частицы действует стационарная сила, характеризующаяся заданной амплитудой и случайным направлением, моделируя тем самым способность частиц к самопроизвольному движению.

В рамках данной задачи особый интерес представляет исследование структуры фронта облака частиц, возникающего при их движении во внешних силовых полях. При этом были рассмотрены два простейших случая поля: однородное, при движении в котором сила, действующая на частицы, представляла собой постоянную величину в любой точке расчетной области, и неоднородное, при движении в котором сила, действующая на частицы, изменялась вдоль направления движения частиц по закону  $F(x) = F_l + \frac{F_r - F_l}{L_x} x$ , где  $F_l$  — величина силы в точке  $x = 0$ ,  $F_r$  — величина силы в точке  $x = L_x$ ,  $L_x$  — размер пространственной области в направлении действия силы.

Для подробного анализа структуры фронта облака частиц был рассчитан его периметр в различные моменты времени. На рис. 1 представлена хронограмма развития периметра фронта облака частиц. В обоих рассмотренных случаях наблюдается нелинейный рост периметра фронта, что свидетельствует о развитии в системе гидродинамической неустойчивости.

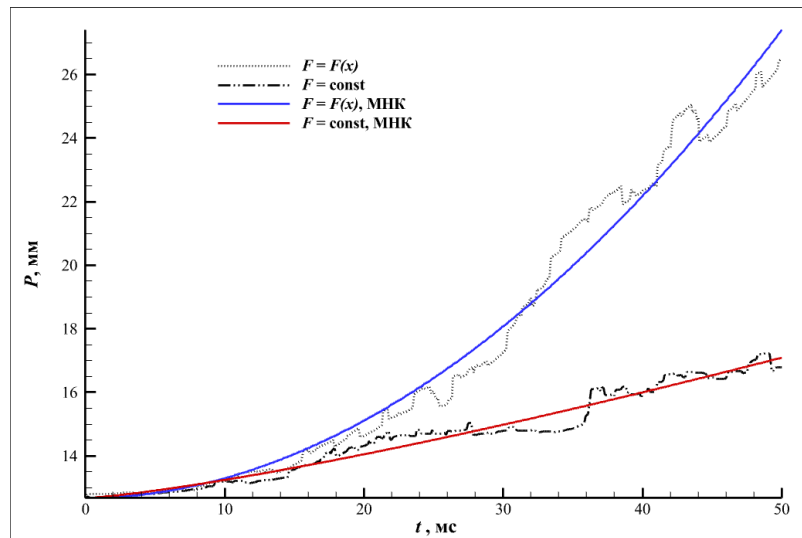


Рис. 1. Оценочные значения периметра фронта облака частиц и его аппроксимация методом наименьших квадратов (МНК)

### Литература

1. McGrattan K., McDermott R., Weinschenk C., Forney G. Fire dynamics simulator: Technical reference guide. [NIST Special Publication 1018, Sixth Edition]. — Gaithersburg (USA): NIST, 2013.
2. Schiller L., Naumann Z. A drag coefficient correlation // Z. Ver. Dtsch. Ing. 1935. V. 77. P. 318–320.

УДК 536.42

### Уравнение состояния меди с малым числом параметров

К. А. Боярских<sup>1,2,3</sup>, К. В. Хищенко<sup>1,2,3,4</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>3</sup>Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН

<sup>4</sup>Южно-Уральский государственный университет

В работе рассмотрены четыре простые модели уравнений состояния. Это уравнение Ван-дер-Ваальса

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}, \quad (1)$$

уравнение из работы [1]

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^{4/3}}, \quad (2)$$

уравнение из работы [2]

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+\chi b)} \quad (3)$$

и уравнение с тремя параметрами, в котором третий параметр определяет степень объема в холодной части давления:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^\xi}, \quad (4)$$

В выражениях (1)–(4)  $P$  — это давление;  $T$  — температура;  $V$  — удельный объем;  $a$ ,  $b$ ,  $\chi$  и  $\xi$  — параметры;  $R$  — удельная газовая постоянная.

Параметры моделей подобраны на основе экспериментальных данных по изобарическому расширению жидкой фазы и зависимости давления от температуры на линии насыщения паров меди. Для всех моделей параметры варьировались в широком диапазоне значений, для каждого набора параметров рассчитывалась изобара, соответствующая экспериментальному давлению. Далее определялось отклонение результатов расчета от экспериментальных данных. Набор параметров, соответствующий наименьшему отклонению, признавался оптимальным.

Также в работе предложен метод расчета теплоемкости на основе данных по ударному сжатию пористых образцов. Разность внутренней энергии на ударной адиабате  $E_H(V)$  и начальной внутренней энергии образца  $E_0$  можно рассматривать, пользуясь калорическим уравнением состояния или соотношением Гюнио. Это иллюстрирует формула

$$E_H(V) - E_0 = \int_{T_0}^{T_H} c_{V0} dT + E_c(V) - E_{c0} = \frac{1}{2}(P_0 + P)(V_{00} - V), \quad (5)$$

где  $E_c(V)$  — холодная энергия на ударной адиабате;  $E_{c0}$  — холодная энергия начального состояния;  $P$  — давление на ударной адиабате;  $V$  — удельный объем на ударной адиабате;  $P_0$  — давление в начальном состоянии;  $V_{00}$  — удельный объем пористого образца;  $T_0$  — температура в начальном состоянии;  $T_H$  — температура на ударной адиабате;  $c_{V0}$  — удельная теплоемкость при постоянном объеме.

Выражая интеграл из (5), в предположении постоянства теплоемкости можно получить ее значение в каждой экспериментальной точке. Давление и удельный объем берутся из эксперимента, температуры и внутренние энергии рассчитываются по уравнению состояния. Полученные точки можно представить на графике зависимости интеграла из (5) от температуры. Предположение постоянства теплоемкости означает, что полученный график имеет вид прямой линии. Поэтому по рассчитанным точкам проводится прямая линия по методу наименьших квадратов. Тангенс угла наклона такой прямой равен искомому значению теплоемкости  $c_{V0}$ . По всем четырем моделям была получена теплоемкость, примерно равная  $3R$ , с отклонением от этого значения около одного процента в большую сторону.

С использованием полученного значения теплоемкости  $c_{V0}$  для меди рассчитывались ударные адиабаты и изоэнтропы разгрузки для исходно пористых образцов. Результаты расчетов и их сравнение с экспериментом представлены на рис. 1.

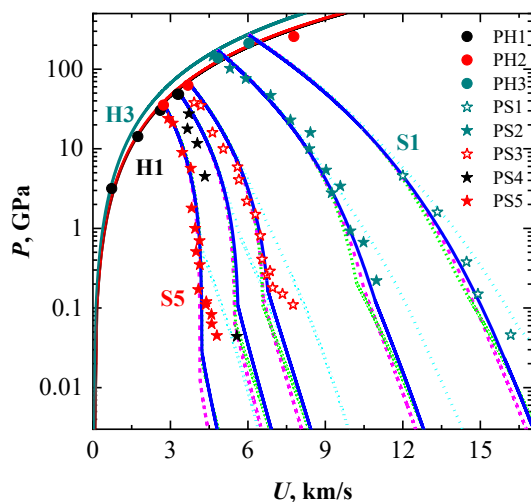


Рис. 1. Ударные адиабаты (H1–H3) и изоэнтропы разгрузки (S1–S5) исходно пористых образцов меди: маркеры — экспериментальные данные (PH1, PS4 — [3]; PH2, PH3, PS1–PS3, PS5 — [4]). Голубыми, розовыми, зелеными и синими линиями показаны результаты расчетов по уравнениям (1), (2), (3) и (4) соответственно

### Литература

1. Ликальтер А. А. Критические точки конденсации в кулоновских системах // УФН. 2000. Т. 170. № 8. С. 831–854.
2. Петрик Г. Г., Гаджиева З. П. Мониторинг. Наука и технологии. 2010. Т. 1(2). С. 67–78.
3. Alekseev Y. L., Ratnikov B. P., Rybakov A. P. Shock adiabats of porous metals // J. Appl. Mech. Tech. Phys. 1971. V. 12. P. 257–262.
4. Al'tshuler L. V., Bushman A. V., Zhernokletov M. V., Zubarev V. N., Leont'ev A. A., Fortov V. E. Unloading isentropes and the equation of state of metals at high energy densities // Sov. Phys. JETP. 1980. V. 51(2). P. 373–383.



## Исследование оптических свойств нитрида гафния при температурах до 4500 К

А. С. Булава<sup>1,2</sup>, А. М. Фролов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Сверхтугоплавкие керамики (УНТС) — класс материалов, имеющих температуру плавления свыше 3500 К. Данные вещества являются перспективными для аэрокосмической отрасли, поскольку способны выдерживать высокие тепловые нагрузки. Особенный интерес может представлять нитрид гафния: потенциально это соединение имеет одну из самых высоких температур плавления среди известных на данный момент керамик. Однако применение этого вещества ограничено отсутствием данных по его теплофизическим свойствам, в частности, о его излучательной способности и температуре плавления. Эти данные необходимы для моделирования поведения материала при воздействии высоких температур.

Наиболее подходящий метод исследования этих характеристик — многоканальная спектрометрия [1, 2]. Однако исследование нитрида гафния этим методом затрудняется сложной зависимостью излучательной способности  $\varepsilon$  от длины волны  $\lambda$ . Для решения этой проблемы в данной работе предлагается измерять отношение коэффициентов отражения  $k$  на двух длинах волн. С его помощью можно найти истинную температуру и излучательную способность, решая следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} I(\lambda_1) = (1 - k \cdot (1 - \varepsilon(\lambda_2, T))) \cdot P(\lambda_1, T), \\ I(\lambda_2) = \varepsilon(\lambda_2, T) \cdot P(\lambda_2, T). \end{cases} \quad (1)$$

Метод был апробирован на образцах молибдена, при этом значения нормальной излучательной способности, определенной предлагаемым методом, с высокой точностью совпадают с рекомендованными в [3].

Исследование образцов нитрида гафния проводилось в атмосфере из высокочистого азота при давлении до 400 атм. Образцы были получены методом прямого нитрирования чистого гафния непосредственно в экспериментальной камере. Впервые определена зависимость излучательной способности от длины волны и от температуры в диапазоне от 2800 до 4500 К, т. е. в том числе при переходе точки плавления. Измеренная зависимость спектральной излучательной способности от температуры представлена на рис. 1, 2. Определенная из экспериментальных данных температура плавления нитрида гафния превышает значения, описанные в [4], более чем на 500 К, что делает его одним из самых тугоплавких соединений, известных на данный момент.

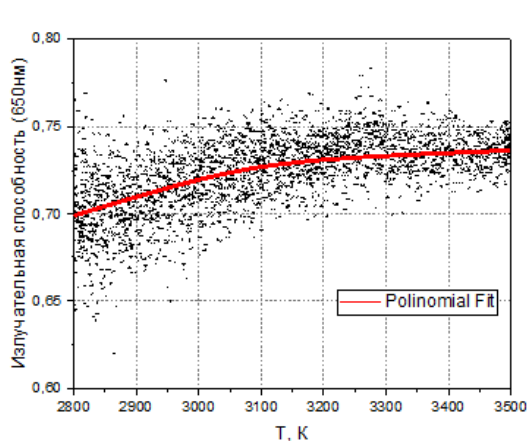


Рис. 1. Зависимость излучательной способности HfN на длине волны 650 нм от температуры

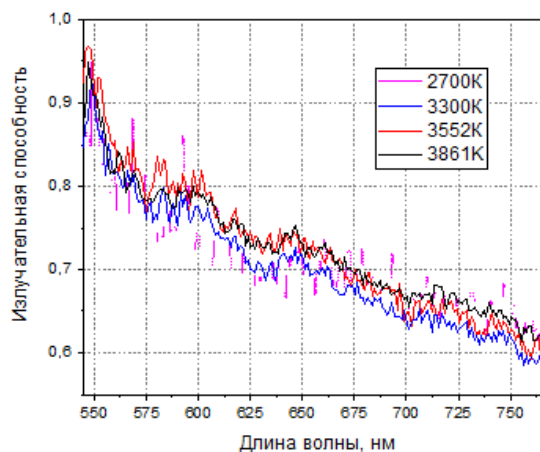


Рис. 2. Спектральная излучательная способность HfN при различных температурах

### 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. V. 104(7). P. 3461–3477.

2. *Sheindlin M., Ronchi C., Heinz W.* Recent advances in highspeed polychromatic pyrometry // Proceedings of 9<sup>th</sup> International Symposium on Temperature and Thermal Measurements in Science and Industry. — Budapest: IMEKO, 2004.
3. *Латышев Л. Н., Петров В. А., Чеховской В. Я., Шестаков Е. Н.* Излучательные свойства твердых материалов. — М: Энергия, 1974.
4. *Ероньян М. А., Аварбэ Р. Г., Данисина И. Н.* Влияние равновесного давления азота на температуру плавления  $TiN_n$ ,  $HfN_n$  // Теплофизика высоких температур. 1976. Т. 14. № 2. С. 398–399.

УДК 533.9...15

## Измерение азимутальной скорости распространения возмущения потенциала плазмы в отражательном разряде с термокатодом

*М. А. Валинуров<sup>1,2</sup>, А. В. Гавриков<sup>1,2</sup>, Г. Д. Лизякин<sup>1</sup>, А. П. Ойлер<sup>1,2</sup>, Р. А. Усманов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время одним из наиболее актуальных направлений для исследований является низко-температурная плазма в скрещенных электрическом и магнитном полях. Данная конфигурация имеет множество практических приложений [1], включая ускорители Холла [2] и плазменные сепараторы, такие как масс-фильтр Т. Оккавы [3] или масс-сепаратор В. П. Смирнова [4]. В подобных устройствах нередко возникают различные плазменные неустойчивости, которые могут повлиять на их работу [5].

В масс-сепараторе В. П. Смирнова ионы разделяемых веществ движутся в скрещенных полях по заранее предсказанным траекториям, которые существенно зависят от потенциала плазмы [6]. В масс-сепараторе наблюдаются колебания потенциала плазмы с большой амплитудой, что приводит к искажению траекторий частиц и ухудшению результата сепарации. Измерения показывают, что колебания обладают закономерностями, что позволяет говорить о распространении некоторого возмущения потенциала плазмы. Изучение данных закономерностей позволит учесть влияние этого возмущения на траектории заряженных частиц при построении компьютерных моделей.

Данная работа посвящена экспериментальному изучению азимутальной компоненты возмущения потенциала плазмы в скрещенных полях. В эксперименте использовался отражательный разряд Пеннинга с термоэмиссионным катодом, в установку с постоянным натеканием 3,5 SCCM (Standard Cubic Centimeter per Minute) подается рабочий газ — аргон. Исследования проводились в цилиндрической установке длиной 230 см, с внутренним диаметром 86 см и диаметром плазменного столба 50 см, при наличии радиального электрического поля 10–15 В/см и аксиального магнитного поля 0,9–1,4 кГс. Температура электронов составляла 6–12 эВ, скорость вращения плазмы в азимутальном направлении 8–10 км/с [7].

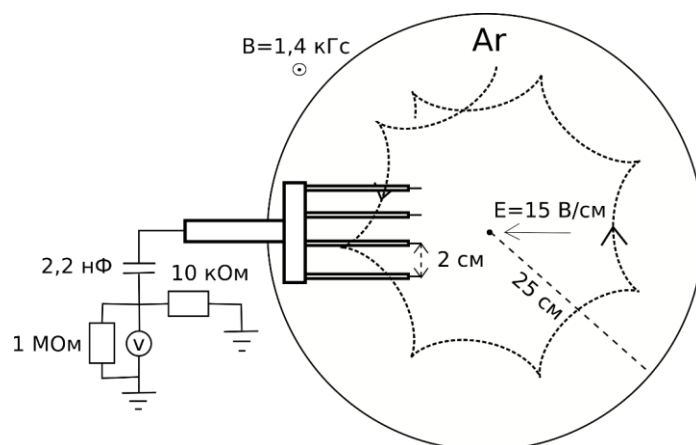


Рис. 1. Схема измерений 4-канальным плавающим зондом

Для детектирования распространения возмущения потенциала плазмы использовался 4-канальный плавающий зонд, расположенный в круговом сечении камеры. Расстояние от центра камеры до зонда составляло 10–20 см, расстояние между соседними детектирующими элементами зонда 2 см. Схема измерений приведена на рис. 1. Полученные результаты анализировались при помощи попарной кросс-корреляции сигналов зондов, по смещению главного пика рассчитывалась скорость распространения воз-

мушения. Пример сигналов и его кросс-корреляционной функции приведены на рис. 2. Для дальнейшей обработки данных также использовались методы фурье-анализа и автокорреляционная функция.

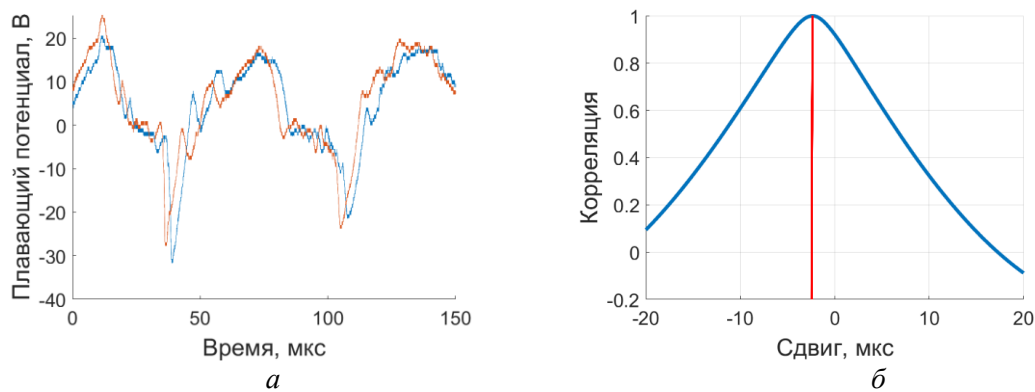


Рис. 2. Пример сигналов с двух каналов зонда (а); пик кросс-корреляционной функции этих двух сигналов (б)

По результатам эксперимента была рассчитана азимутальная компонента скорости распространения возмущения, составившая  $V_p \approx 14$  км/с, а также выдвинута гипотеза, что скорость возмущения равна сумме скорости вращения плазмы и скорости звука:  $V_p = V_{rot} + V_s$ . В качестве объяснения полученных результатов выдвинуто предположение о наличии некоторой спицевой структуры, ранее уже наблюдавшейся при движении заряженных частиц в скрещенных полях [8].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-19-00716.

### Литература

1. *Kaganovich I. D.* [et al.] Physics of E×B discharges relevant to plasma propulsion and similar technologies // *Phys. Plasma*. 2020. V. 27. № 12: 120601.
2. *Choueiri E. Y.* Plasma oscillations in Hall thrusters // *Phys. Plasma*. 2001. V. 8(4). P. 1411–1426.
3. *Ohkawa T., Miller R. L.* Band gap ion mass filter // *Phys. Plasma*. 2002. V. 9(12). P. 5116–5120.
4. *Liziakin G.* [et al.] Plasma mass separation in configuration with potential well // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2021. V. 54(41): 414005.
5. *Михайловский А. Б.* Теория плазменных неустойчивостей. — М.: Атомиздат, 1975.
6. *Oiler A. P.* [et al.] The optimal axis-symmetrical plasma potential distribution for plasma mass separation // *Molecules*. 2022. V. 27(20): 6824.
7. *Ойлер А. П.* [и др.] Скорость вращения плазмы в отражательном разряде с термокатодом // *ЖТФ*. 2022. Т. 92. № 10. С. 1529.
8. *Kim J. Y.* [et al.] Magnetic confinement and instability in partially magnetized plasma // *Plasma Sources Sci. Technol.* 2021. V. 30(2): 025011.

УДК 533.697/9

## Моделирование влияния локального импульсно-периодического нагрева на эффективность смещения поперечной струи со сверхзвуковым потоком

*Л. С. Волков<sup>1,2</sup>, А. А. Фирсов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

В данной работе рассматривается течение, которое образуется при взаимодействии сверхзвукового потока и вторичной поперечной струи. В англоязычной литературе для этого течения принято обозначение JISC (jet interacting with supersonic crossflow). Это течение имеет место, например, при инъекции топлива через отверстие на твердой поверхности в камере сгорания со сверхзвуковым потоком воздуха. В настоящее время в России и за рубежом динамично развивается направление исследований, связанных с разработкой технологий для интенсификации смешения газов в указанной конфигурации, что необходимо для повышения их эффективности [1].

Одна из перспективных стратегий интенсификации смешения предусматривает импульсный локальный нагрев газа в области взаимодействия поперечной струи со сверхзвуковым потоком. Такой

нагрев может быть осуществлен, например, электрическими разрядами [2] или лазерным излучением [3]. Данная работа посвящена исследованию воздействия импульсно-периодического нагрева на стенке с наветренной стороны от отверстия инжектора на эффективность смешения газов в JISC. Целью данной работы было получение информации о локальных характеристиках течения в области взаимодействия вторичной поперечной струи со сверхзвуковым потоком воздуха при отсутствии и наличии импульсного локального нагрева, а также сравнение эффективности смешения в этих случаях.

Для получения необходимой информации было проведено компьютерное моделирование в отечественном программном комплексе FlowVision. Для моделирования течения осуществлялось решение нестационарных уравнений Навье–Стокса, осредненных по Рейнольдсу. Использовалась модель турбулентности KEFV — модифицированная модель  $k-\varepsilon$ , одна из стандартных моделей турбулентности FlowVision [4]. Физические параметры были выбраны таким образом, чтобы рассматриваемые явления можно было воспроизвести в натурном эксперименте на оборудовании, доступном в ОИВТ РАН. Параметры свободного сверхзвукового потока воздуха: температура  $T_g = 183$  К, давление  $P = 28,4$  кПа, число Маха  $M = 1,8$ , скорость  $U_{fs} = 480$  м/с. Параметры вторичной струи: диаметр  $d = 3$  мм, газ —  $\text{CO}_2$ , полная температура  $T_0 = 270$  К, массовый расход  $Q_m = 4$  г/с, скорость  $U_{jet} = 236$  м/с. Таким образом, отношение удельных импульсов струи (jet) и свободного потока (freestream) [1] составило

$$J = \frac{(\gamma PM^2)_{jet}}{(\gamma PM^2)_{fs}} = \frac{(\rho U^2)_{jet}}{(\rho U^2)_{fs}} = 0,94. \quad (1)$$

Для симуляции импульсного нагрева в модели был предусмотрен модификатор, добавляющий в УНС член с объемным тепловыделением в заданной области. Область тепловыделения имела форму цилиндра со скругленными торцами. В каждом импульсе выделялось  $W = 10$  мДж энергии, при этом длительность импульса составляла  $\tau = 2$  мкс, а период  $T = 25$  мкс. Таким образом, числа Струхалия, рассчитанные для струи и свободного потока, были равны соответственно

$$Sr_{jet} = \frac{d}{TU_{jet}} = 0,51; \quad Sr_{fs} = \frac{d}{TU_{fs}} = 0,25. \quad (2)$$

Были рассчитаны два случая течения: в отсутствие нагрева и при импульсном нагреве газа в области с наветренной стороны от инжектора. Для каждого случая были визуализированы поля следующих величин в области около инжектора: число Маха, массовая доля углекислого газа. Эффективность смешения определялась с помощью численного критерия  $\eta_m$ , используемого в работах по смешению газов в сверхзвуковом потоке [5]:

$$\eta_m = \frac{\int Y_r \rho U dA}{\int Y \rho U dA}, \quad Y_r = \begin{cases} Y, & Y \leq Y_{st}, \\ Y_{st} \cdot \left( \frac{1-Y}{1-Y_{st}} \right), & Y > Y_{st}, \end{cases} \quad (3)$$

где интегрирование производится по площади некоторого сечения струи,  $\rho$  — плотность смеси,  $U$  — локальная скорость,  $Y$  — массовая доля газа вторичной струи в смеси,  $Y_{st}$  — массовая доля в стехиометрической смеси. Поскольку рассматривается нереагирующая смесь  $\text{CO}_2$  с воздухом, было произвольно принято  $Y_{st} = 0,5$ .

На рис. 1 изображены распределения массовой доли  $\text{CO}_2$  и температуры в один и тот же момент времени в случае наличия импульсно-периодического нагрева. Видно, что вокруг нагретой порции  $\text{CO}_2$  в струе образуется вихрь. Таким образом, источник тепла выступает в роли вихрегенератора и увеличивает скорость смешения.

Диаграмма на рис. 2 отображает эффективность смешения в нескольких поперечных сечениях струи ( $x = 5$  мм, 10 мм, 15 мм, 20 мм), усредненную по времени нескольких периодов нагрева. Кроме  $\eta_m$ , в качестве критериев оценки эффективности смешения использовались глубина проникновения струи и распределение турбулентной энергии (одной из величин модели KEFV). Результаты расчета позволяют утверждать, что рассмотренный способ воздействия на течение JISC способен привести к повышению эффективности смешения.

Необходимо параметрическое исследование, которое позволило бы найти оптимальные режимы возбуждения струи в сверхзвуковом потоке для обеспечения наибольшей эффективности смешения. Результаты моделирования будут использованы при подготовке натурального эксперимента по возбуждению струи в сверхзвуковом потоке периодическими искровыми разрядами на плоской поверхности.

Исследование поддержано грантом РФФИ № 21-79-10408.

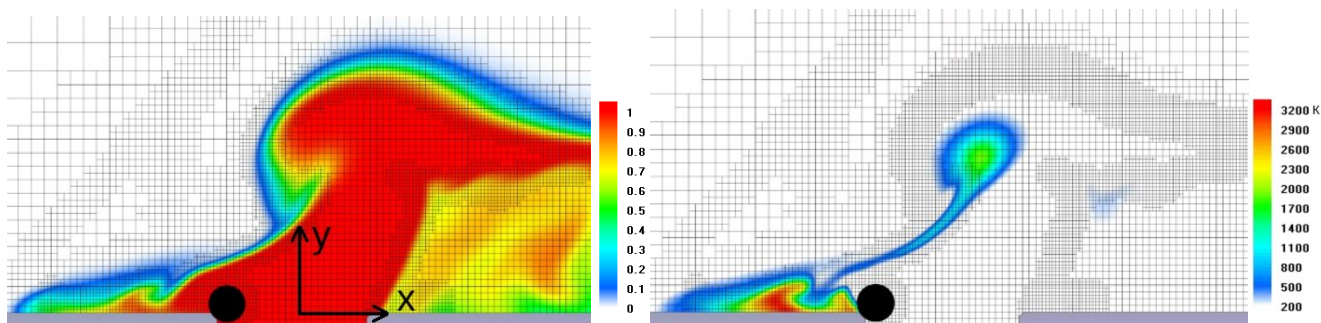


Рис. 1. Мгновенное распределение массовой доли  $\text{CO}_2$  (слева) и температуры (справа) в случае наличия импульсно-периодического локального нагрева газа. Черным цветом обозначена область нагрева

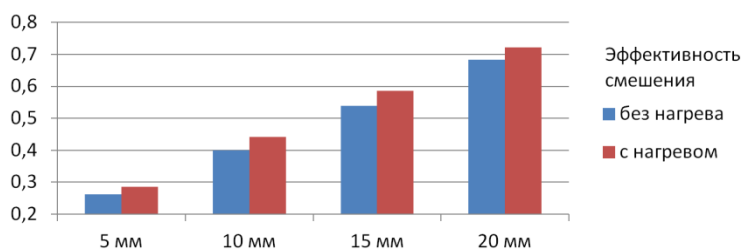


Рис. 2. Усредненная во времени величина  $\eta_m$  в нескольких поперечных сечениях струи

### Литература

1. Liu Q. [et al.]. Review of combustion stabilization for hypersonic airbreathing propulsion // Prog. Aerosp. Sci. 2020. V. 119: 100636.
2. Долгов Е.В. [и др.] Исследование влияния искрового разряда на смешение струи газообразного топлива со сверхзвуковым воздушным потоком // Компьютерные исследования и моделирование. 2019. Т. 11. № 5. С. 849–860.
3. Lazar E. [et al.]. Energy deposition applied to a transverse jet in a supersonic crossflow // AIAA Journal. 2010. V. 48(8). P. 1662–1672.
4. Жлуктов С.В., Аксенов А.А. Пристеночные функции для высокорейнольдсовых расчетов в программном комплексе FlowVision // Компьютерные исследования и моделирование. 2015. Т. 7. № 6. С. 1221–1239.
5. Liu C. [et al.]. Dynamics and mixing mechanism of transverse jet injection into a supersonic combustor with cavity flameholder // Acta Astronaut. 2017. V. 136. P. 90–100.

УДК 544.452.2

## Волна горения в области смешения водорода с воздухом

**В. А. Воронов**

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Водород — высокоэффективное и экологически чистое горючее, использование которого является одним из самых перспективных путей получения тепловой энергии. Развитие водородной энергетики сопровождается повышенными требованиями безопасности, обусловленными его высокой реакционной способностью. Целью моей работы является моделирование и исследование различных задач распространения и горения водорода в воздушной смеси. Интерес представляет анализ полученных моделей при различных задаваемых условиях для задачи.

В начале работы была сформулирована и реализована постановка задачи об истечении водорода в воздух, наполняющий замкнутый объем. В рамках сформулированной постановки задачи водород поступает через отверстие заданного диаметра с заданной скоростью. Осуществлен анализ поля концентрации водорода. Затем было произведено зажигание смеси и проведено исследование распространения горения.

Дальнейшей целью работы является анализ развития волн горения в области смешения водорода с воздухом, а численный анализ различных сценариев истечения позволит получить новые данные, необходимые для решения задач водородной безопасности. Пример полученного промежуточного результата моделирования в одном из сценариев (распространение водорода в воздушной смеси в замкнутом

объеме) приведен на рис. 1. В результате были получены картины распространения концентрации водорода в воздушной смеси и волны горения на границе водорода с воздухом в замкнутом объеме.

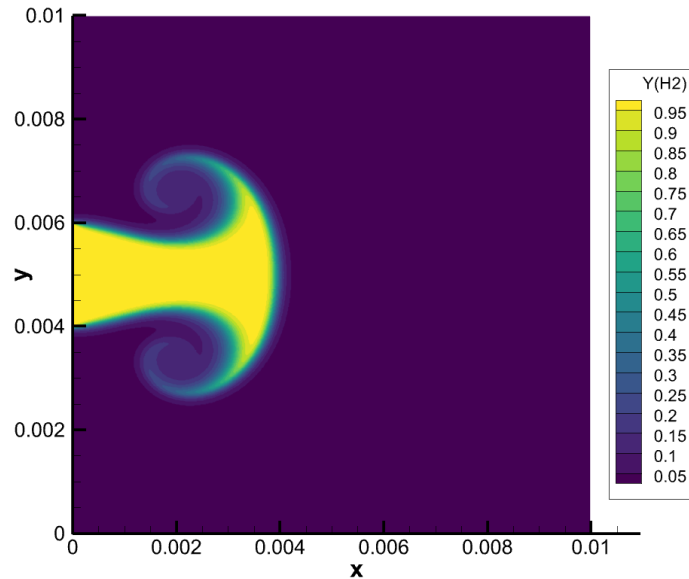


Рис. 2. Распределение (промежуточное) концентрации водорода в замкнутом двумерном объеме (скорость истечения  $v = 10$  м/с, температура стенок  $T = 0$  К)

### Литература

1. Гельфанд Б. Е., Попов О. Е., Чайванов Б. Б. Водород: параметры горения и взрыва. — М.: Физматлит, 2008.
2. Орловский С. Н. Теория горения и взрыва: учеб. пособие. — Красноярск: Краснояр. гос. аграр. ун-т, 2019.
3. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ: пер. с англ. Г. Л. Агафонова / Под ред. П. А. Власова. — М.: Физматлит, 2003.

УДК 533.27

### Состояния материи за фронтом ударной волны в смеси тяжелого и легкого газов

Г. В. Выскварко<sup>1,2</sup>, С. А. Дьячков<sup>1,2</sup>, П. Р. Левашов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В задачах гидроаэродинамики обычно предполагается, что ширина фронта ударной волны незначительна, а термодинамическое равновесие достигается мгновенно. Было показано, что ширина фронта конечна вследствие диффузии, теплопроводности и вязкости и пропорциональна средней длине пробега молекулы [1]. В наши дни границы теоретических предсказаний можно проверить, используя моделирование методом молекулярной динамики.

В этой работе мы анализируем состояние за ударной волной в двухкомпонентной смеси легкого и тяжелого газов, которая также была рассмотрена в [1]. Используя метод подвижного окна [2, 3], возможно получить стационарное состояние с фронтом ударной волны в пределах расчетной области и собрать статистические данные. Анализ средней температуры и распределений скорости позволяет нам проверить, наблюдаются ли некие отклонения от теории.

При компьютерном моделировании использовался метод молекулярной динамики (MD), в котором численно решались уравнения движения Ньютона для системы взаимодействующих частиц, где силы и потенциальные энергии частиц рассчитывались с использованием потенциала Леннарда-Джонса:

$$V_{LJ} = 4\epsilon \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6.$$

Для получения стационарного положения фронта ударной волны в расчетной области использовался метод подвижного окна. Его положение (скорость втекания вещества) регулировалось параметром

$\omega = (x_{\text{front}} - x_{\text{out}})/(x_{\text{front0}} - x_{\text{out}})$ , где  $x_{\text{front}}$  — текущее положение фронта,  $x_{\text{front0}}$  — желаемое положение фронта,  $x_{\text{out}}$  — положение области выхода. Если  $\omega > 1$ , то скорости всех частиц смещались на  $dv = |u_{\text{in}}| - v_{\text{shock}}$ , иначе — на  $dv = \min(|u_{\text{out}}|, 5 \text{ м/с})$ .

Моделирование проводилось для аргона (с атомной массой 40) и гелия (с атомной массой 4) в разных пропорциях (20/80, 50/50, 80/20). Число шагов моделирования — 70000, шаг по времени — 4 фс. Также была проведена серия расчетов для смеси ксенона (атомной массой 131) и гелия с шагом по времени 2 фс. Сначала фронт ударной волны стабилизировался в расчетной области, затем каждые 50 шагов усреднялись данные по концентрации, плотности, температуре, скорости и давлению, и по ним строились профили распределений. За 2 нм до фронта волны в окне шириной 4 нм каждые 50 шагов собирались данные о частицах, которые затем были использованы для построения графиков распределения модуля скорости для сравнения с теоретическим распределением Максвелла для такой же температуры (рис. 1).

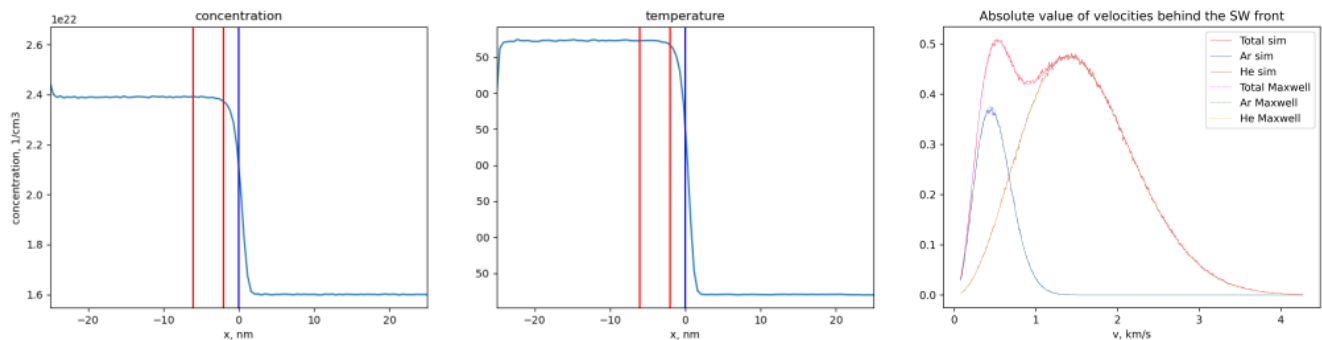


Рис. 1. Распределения концентрации и температуры по оси  $x$  для смеси аргона и гелия в соотношении 20 : 80, красными линиями отмечена область сбора данных для распределения скоростей, на третьем графике — распределение модулей скоростей для частиц гелия, аргона, общее распределение и соответствующие распределения Максвелла

## Литература

1. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. 3-е изд., испр. — М.: Физматлит, 2008.
2. Murzov S. A. [et al.]. Simulation of stationary shock waves in porous copper with smoothed particle hydrodynamics // High Temp. 2021. V. 59(2) P. 195–204.
3. Zhakhovskii V. V., Zybin S. V., Nishihara K., Anisimov S. I. Shock wave structure in Lennard-Jones crystal via molecular dynamics // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. P. 1175–1178.

УДК 538.958

## Математическое моделирование эксперимента с быстрым электрическим нагревом образца

А. Ч. Гаврильев<sup>1,2</sup>, В. Н. Сенченко<sup>1</sup>, С. А. Мельников<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящей работе применительно к эксперименту на установке с импульсным электрическим нагревом образца было численно проведено определение параметров разрядной цепи. По полученным экспериментальным данным зависимости напряжения на образце от времени был рассчитан вклад как реактивной составляющей в измерительном контуре, так и значение активной составляющей.

Использованный метод микросекундного импульсного нагрева основан на джоулевом объемном нагреве при прохождении через образец большого импульса тока до 14 кА, который позволяет за время порядка 100 мкс нагревать электропроводные образцы выше температуры плавления на 1000–2000 К.

На рис. 1 показана принципиальная схема модели эксперимента. Модель состоит из батареи конденсаторов емкости  $C$ , заряженных до начального напряжения  $U_0$  индуктивности  $L$ , а также сопротивлений. Сопротивление  $R_1$  включает в себя сопротивление катушки, а также все активные сопротивления, которые имеются на участке цепи, когда батарея конденсаторов замкнута. Это сопротивления проводов, различных соединений, а также внутреннее сопротивление конденсаторов. Сопротивление  $R_2$  включает в себя все сопротивления, которые имеются в цепи, когда батарея конденсаторов разомкнута.

Сопротивление образца учитывается отдельно, оно является величиной, зависящей от удельной энергии, введенной в образец.

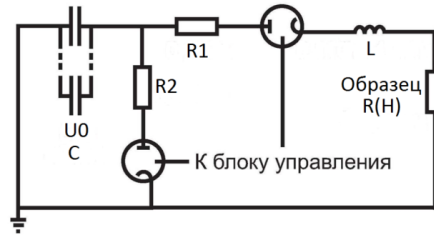


Рис. 1. Схема разрядной цепи

Таким образом, модель эксперимента в самом простом приближении представляет собой обычную  $RLC$ -цепочку с переменным сопротивлением. Система уравнений, которые используются в модели, выглядит следующим образом.

В момент времени, когда цепь замкнута на батарею конденсаторов, решается следующая система уравнений:

$$\begin{cases} \frac{q}{C} + L \frac{dI}{dt} + (R_1 + R(H))I = 0 \text{ (закон Кирхгофа для цепи),} \\ I = \frac{dq}{dt}, & (0 \leq t \leq \tau), \\ \frac{dH(t)}{dt} = I^2(t)R(H) \text{ (уравнение баланса ввода энергии в образец).} \end{cases} \quad (1)$$

В данной системе уравнений  $q$  — заряд на конденсаторах;  $I$  — ток в системе;  $H$  — энергия, введенная в образец;  $\nu$  — количество моль вещества в образце.

Начальные условия для системы уравнений:  $q_{t=0} = -U_0C$  (конденсаторы заряжены до напряжения  $U_0$ );  $I_{t=0} = 0$  (в начальный момент времени ток в цепи отсутствует);  $H_{t=0} = 0$  (образец не нагрет).

В момент времени, когда ключ размыкается, и батарея замкнута на разрядное напряжение, решаемая система уравнений выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} L \frac{dI}{dt} + (R_2 + R(H))I = 0, \\ \frac{dH(t)}{dt} = I^2(t)R(H). \end{cases} \quad (\tau < t \leq t_{\max}) \quad (2)$$

Начальные условия для этой системы ( $I_{t=\tau}$ ,  $H_{t=\tau}$ ) берутся из решения предыдущей системы.

Обе системы уравнений решаются в системе MATLAB численным методом Рунге–Кутты четвертого порядка.

Пример сравнения экспериментальной зависимости разрядного тока и тока, рассчитанного по параметрам, полученным из решения системы уравнений (1)–(2), приведен на рис. 2.

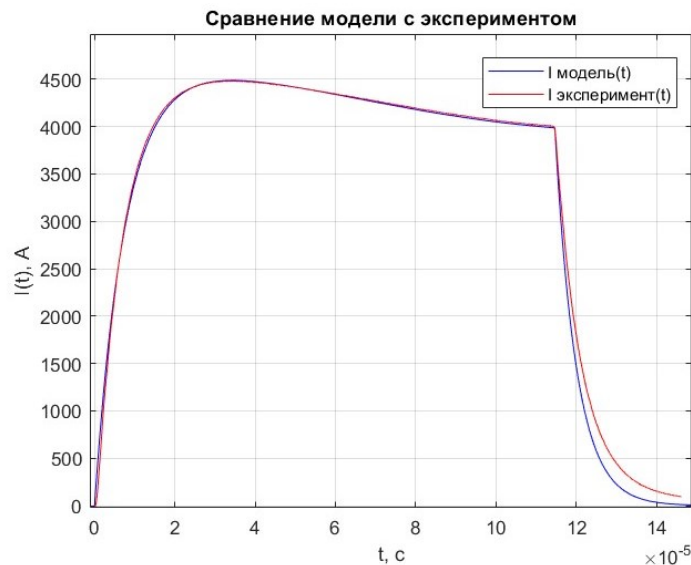


Рис. 2. Сравнение кривой тока, полученной в моделировании, с экспериментальной кривой



Также была определена по экспериментальным данным реактивная составляющая в контуре измерения напряжения, чтобы уточнить реальное напряжение на образце.

Сопrotивление образца  $R_{\text{exp}}$  находится с помощью закона Ома на участке, где ток через образец  $I_{\text{exp}}$  изменяется незначительно, и экстраполируется на все время эксперимента.  $U_{\text{exp}}$  — напряжение между зондами измерения напряжения образца. Используя закон Кирхгофа для измерительного контура, можно найти распределенную индуктивность  $L_1$  и получить скомпенсированное напряжение (рис. 3)

$$L_1 \frac{dI_{\text{exp}}}{dt} = U_{\text{exp}} - I_{\text{exp}} R_{\text{exp}}. \quad (3)$$

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 19-19-00713.

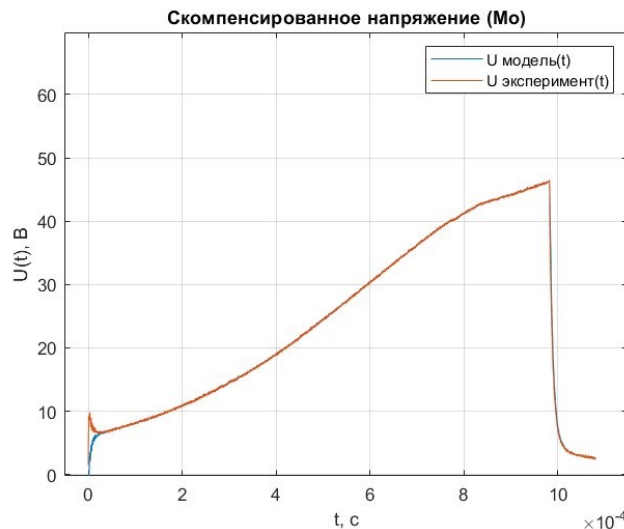


Рис. 3. Зависимость скомпенсированного и нескомпенсированного напряжения от времени

### Литература

1. Сенченко В. Н., Мельников С. А. Материалы Восьмой Российской национальной конференции по теплообмену. (Москва, 17–22 октября 2022 г.): в 2 т. — М.: Издательство МЭИ, 2022. Т. 2. С. 235–236.
2. Гурвич Л. В. [и др.] Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание: в 4-х т., 3-е изд., перераб. и расширен. Т. III. Кн. 2. — М.: Наука, 1981.

УДК 533.9.082

### Трехмерная диагностика динамики янус-частиц в разряде низкого давления

Д. А. Заморин<sup>1,2</sup>, Р. А. Сыроватка<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Проведена 3D-диагностика [1, 2] динамики янус-частиц в разряде низкого давления, включающая в себя калибровку камер и определение координат частиц и их траекторий. Данные, полученные с помощью диагностики, использовались для дальнейшей обработки и изучения динамики плазменно-пылевой структуры и для оценки погрешности используемого метода.

Калибровка камеры происходит с помощью шаблона в виде шахматной доски, в результате которой определяется взаимное расположение камер и дисторсия объективов, что впоследствии корректирует полученные 3D-координаты частиц.

Оценка погрешности метода 3D-диагностики проводилась путем измерения расстояния между отверстиями (имитация пылевых частиц), проделанными тонкой иглой в темной бумаге, закрепленной на подставке и подсвечиваемой снизу (рис. 1а). Предварительно расстояние  $d$  между отверстиями было измерено с помощью штангенциркуля ( $d = 11,90 \pm 0,05$  мм) и измерительной лупы ( $d = 11,90 \pm 0,05$  мм). Был обработан 21 кадр и вычислено расстояние между отверстиями. Среднее значение в выборке составило  $\mu = 11,936$  мм, а дисперсия  $\sigma = 0,0185$  мм. Полученное распределение (рис. 1б) можно считать распреде-

лением Стьюдента со степенью свободы 20. Вычислено, что погрешность, приводящая к 99,5% доверительному интервалу, составляет 0,48%.

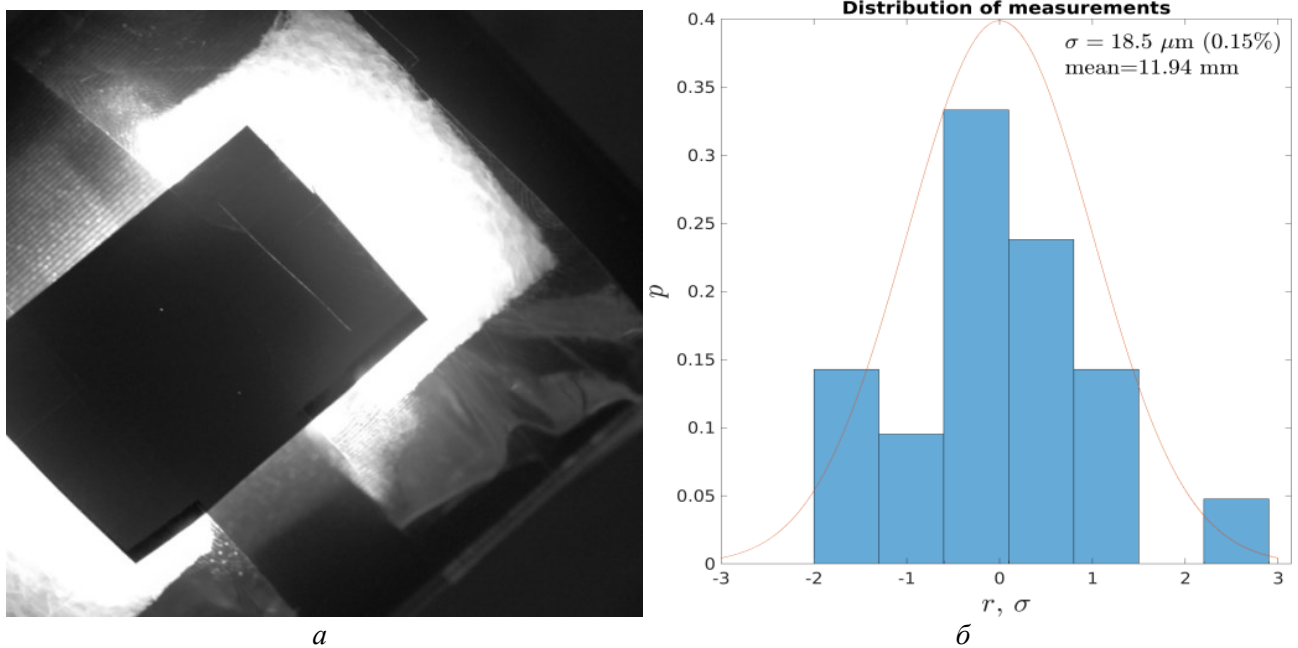


Рис. 1. Закрепленный листочек с отверстиями (а); гистограмма расстояний между отверстиями, полученных на разных кадрах (б)

Эксперименты проводились с меламинформальдегидными частицами размера от 5 до 12 мкм, покрытыми медью с одной стороны (янус-частицы) в аргоновой плазме низкого давления ( $p = 2 \div 5$  Па) ВЧ-разряда с частотой  $f = 13,56$  МГц при мощности разряда  $W = 2 \div 6$  Вт и мощности лазера  $W = 0,15 \div 3$  Вт.

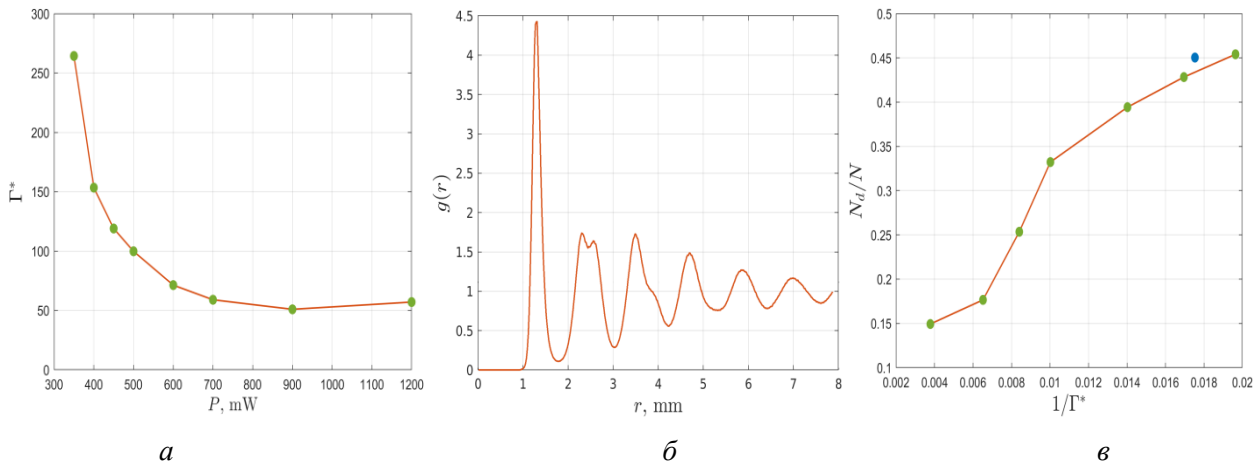


Рис. 2. Зависимость параметра неидеальности  $\Gamma^*$  от мощности лазера (а); парная корреляционная функция при мощности лазера 350 мВт (б); зависимость относительного числа дефектов от параметра неидеальности (в)

Для оценки динамики структуры и ее свойств на основе координат, полученных 3D-диагностикой, были вычислены: парная корреляционная функция  $g(r)$ , локальный параметр порядка  $\Psi_6$  [3] и эффективный параметр неидеальности  $\Gamma^*$  [4]:

$$g(r) = \frac{N(r, r+dr)}{2\pi r dr N/S}, \quad (1)$$

$$\Psi_6 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \exp(6i \theta_j). \quad (2)$$

Здесь  $N$  — число частиц в наблюдаемой области,  $S$  — площадь этой области,  $N(r, r+dr)$  — число частиц в кольце,  $n$  — число соседних частиц,  $\theta_j$  — угол между выбранной частицей и  $j$ -й соседней частицей. Эффективный параметр неидеальности  $\Gamma^*$  определялся из парной корреляционной функции:  $\Gamma^* = f \left( \frac{g_{\max}}{g_{\min}} \right)$ , где

$g_{\max}$  — первый максимум парной корреляционной функции  $g(r)$ , вычисленной по формуле (1), а  $g_{\min}$  — ее первый минимум,  $f$  — функция, определенная численным моделированием для трехмерных и квазидвумерных структур. В работе использовались данные для квазидвумерной структуры.

Было установлено, что активные янус-частицы образуют гексатическую квазидвумерную структуру с дефектами (парная корреляционная функция на рис. 2б). Из анализа зависимости эффективного коэффициента неидеальности  $\Gamma^*$  от мощности лазера видно, что при увеличении мощности лазера  $\Gamma^*$  падает (рис. 2а), а количество дефектов в структуре растёт (рис. 2в).

### Литература

1. Сыроватка Р. А., Лунаев А. М., Наумкин В. Н., Клумов Б. А. Плазменный кристалл в (3+1) измерениях // Письма в ЖЭТФ. 2022.
2. Hartley R., Zisserman A. Multiple View Geometry in computer vision (second edition). — Cambridge: Cambridge University Press, 2003.
3. Sheng-Yuan Zeng, Chih-Hao Hsu, Ten-Ming Wu. Bond Orientational Order Parameters for 3) Classifying Solid-like Clusters in a Lennard-Jones System near Liquid–Solid Transition and at Solid States // J. Phys. Chem. A (2022).
4. Vaulina O. S., Dranzhevski I. E. Transport of macroparticles in dissipative two-dimensional Yukawa systems // Phys. Scr. 2006. V. 73(6): 577.

УДК 537.52

### Исследование спектра излучения, инициируемого импульсным разрядом по поверхности феррита

С. М. Климович<sup>1,2</sup>, А. В. Бернацкий<sup>1</sup>, С. Н. Андреев<sup>1</sup>, А. П. Шевелько<sup>1</sup>, С. Н. Цхай<sup>1</sup>, С. Ю. Савинов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В ряде современных работ [1–4] исследуется импульсный разряд по поверхности феррита (прикладываемое напряжение ~300 кВ). В [1] наблюдалось интенсивное излучение в видимом диапазоне, также в диапазоне энергий от 150 до 280 эВ. В работе [2] на той же установке исследовался спектр в диапазоне  $10^{-2} \div 10$  кэВ, установлено, что максимум излучения находится на 0,1 кэВ (~120 Å). Стоит отметить, что в [1, 2] регистрация излучения проводилась с помощью алмазного детектора, распределение по энергиям определялось путем размещения перед детектором фольг, различных материалов и толщин. Таким образом, применяемая техника позволяла получать спектр низкого разрешения.

В рамках данной работы на установке БАЦ [3, 4] с помощью оптического спектрометра с дифракционной решеткой проводилась регистрация спектра излучения, инициируемого импульсным разрядом по поверхности феррита, с последующей расшифровкой (в области 100 ÷ 250 Å).



Рис. 1. Пример регистрируемого спектра

В качестве источника импульсного напряжения разряда использовался модифицированный рентгеновский аппарат Арина-9 (обеспечивает напряжение до 300 кВ с фронтом нарастания ~1 нс). Амплитуда тока при пробое составляла ~1 кА. Подробное описание экспериментальной установки дано в [3, 4]. Феррит марки М1000НН (20×50×4 мм<sup>3</sup>) крепился при помощи медных электродов, регистрация излучения производилась со стороны анода. Пример регистрируемого спектра изображен на рис. 1.

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 Phys. Rep. 2018. V. 44(6). P. 600–604. DOI: 10.1134/S1063780X18060107.

2. *Tilikin I. N., Savinov S. Yu., Pestovskii N. V., Pikuz S. A., Tskhai S. N., Shelkovenko T. A., Dushkin G. A.* Coherent X-ray radiation induced by high-current breakdown on a ferrite surface // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2022. V. 55(40): 405006. DOI: 10.1088/1361-6463/ac83cf.
3. *Andreev S. N., Bernatskiy A. V., Dushkin G. A., Tskhai S. N., Pikuz S. A., Tilikin I. N., Shelkovenko T. A., Savinov S. Yu.* Spatial characteristics of radiation initiated by a discharge over the ferrite surface // *Bulletin of the Lebedev Physics Institute.* 2021. V. 48. P. 321–326. DOI: 10.3103/S1068335621100031.
4. *Andreev S. N., Bernatskiy A. V., Dushkin G. A., Tskhai S. N., Tilikin I. N., Pikuz S. A., Savinov S. Yu.* Spatial distributions of X-ray radiation during ferrite surface breakdown // *J. Phys. Conf. Ser.* 2022. V. 2270: 012039. DOI: 10.1088/1742-6596/2270/1/012039.

УДК 533.9.03

## Диффузный вакуумный дуговой разряд во внешнем магнитном поле

**А. Д. Мельников<sup>1,2</sup>, Р. А. Усманов<sup>2</sup>, В. П. Полищук<sup>2</sup>, Н. Н. Антонов<sup>2</sup>, А. В. Гавриков<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Данная работа посвящена экспериментальному исследованию влияния величины внешнего магнитного поля на параметры плазмы, генерируемой в вакуумном дуговом разряде. Высокая производительность источника плазмы на основе вакуумного дугового разряда в совокупности с возможностью достичь высокой степени ионизации выходящего плазменного потока позволяют рассматривать данный тип разряда в качестве источника плазмы сепарируемых элементов в рамках задачи плазменной переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) [1–3]. Диффузная форма вакуумного дугового разряда реализуется при относительно высоких температурах катода и позволяет избежать присутствия капельной фракции в потоке генерируемой плазмы, которая характерна для вакуумных дуг с катодными пятнами. Вакуумный дуговой разряд используется в активно развивающихся и уже традиционных прикладных задачах: плазменных методах создания функциональных покрытий [4] и в методах создания потоков многозарядных ионов [5]. С другой стороны, исследование вакуумного дугового разряда актуально и с точки зрения фундаментальной физики, так как до сих пор остаются пробелы в понимании физических процессов в разряде (например, при объяснении механизма ускорения ионов или создании окончательной модели катодного пятна).

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 катод-анодном промежутке шириной 3 см. Материалом катода был выбран  $\text{CeO}_2$ , так как он используется для моделирования процесса перевода  $\text{UO}_2$  в плазменное состояние в рамках работ по разработке технологии плазменной сепарации ОЯТ. Катод представлял собой спеченную и восстановленную до стехиометрического состава таблетку массой около 5 г. Таблетка помещалась в подогреваемый молибденовый тигель. Температура тигля диагностировалась яркостным пирометром. Магнитное поле в арочной конфигурации создавалось постоянными неодимовыми магнитами, расположенными на специальном охлаждаемом держателе за анодом разряда. Режим работы источника плазмы определялся током, напряжением дуги и величиной магнитного тока вблизи катода.

Была экспериментально измерена зависимость напряжения горения диффузной вакуумной дуги от величины магнитного поля в диапазоне 30–90 Гс (рис. 1а). Наложение магнитного поля в арочной конфигурации величиной 90 Гс приводило к повышению напряжения разряда до 57 В, т. е. примерно в 5 раз больше, чем без магнитного поля. Показано, что магнитное поле в арочной конфигурации приводит к ухудшению стабильности горения разряда, и при величине магнитного поля более 100 достигнуть устойчивого горения разряда невозможно.

Т а б л и ц а 1. Средний заряд диффузной вакуумной дуги при разных значения магнитного поля

$H_{\text{катод}}$ , Гс	$I_{\text{арс}}$ , А	$U_{\text{арс}}$ , В	$P_{\text{арс}}$ , Вт	$t_{\text{exp}}$ , мин	Средний заряд, $e$
55	46	33-35	1564	3	2,04
30	37	33-39	1332	5	1,71
0	41	10	410	5	0,45
0	100	13	1300	5	0,75

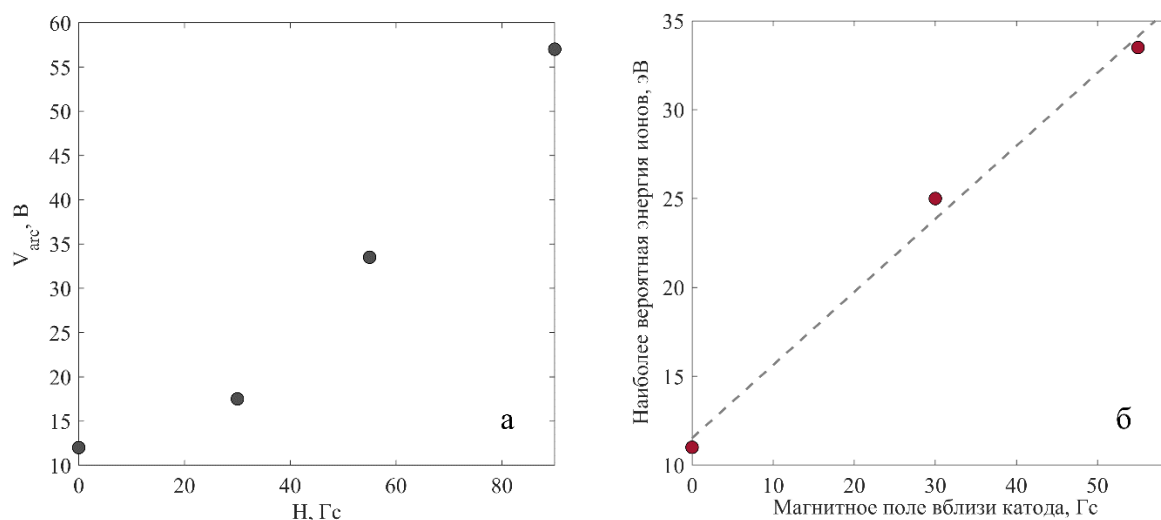


Рис. 1. Зависимость напряжения диффузной вакуумной дуги от величины магнитного поля при токе 46 А и температуре тигля 2000°С (а); наиболее вероятная энергия ионов в зависимости от величины магнитного поля вблизи катода при токе разряда 46 А (б)

В ходе экспериментов методом конденсационного зонда был измерен средний заряд потока плазмы. Полученные данные представлены в табл. 1 для нескольких режимов дугового разряда по току и величине магнитного поля. Характерное время экспозиции конденсационного зонда составляло 3–5 минут. Многосеточным зондом были измерены энергетические распределения ионов плазмы. Установлены зависимости наиболее вероятной энергии ионов и полуширины спектра от величины магнитного поля в диапазоне 30–90 Гс и величины тока разряда в диапазоне 30–60 А (рис. 1б).

Посредством анализа оптических спектров излучения плазмы было установлено присутствие в плазме ионов церия и молибдена первой и второй кратности. При повышении величины магнитного поля менялась интенсивность спектральных линий двукратных ионов. Спектральные линии трехкратных и четырехкратных церия или молибдена во всех исследовавшихся режимах (магнитное поле 30–90 Гс, ток 30–60 А, температура тигля 1950–2100°С) обнаружены не были.

Качественно характер горения разряда во внешнем магнитном поле носит менее стабильный характер, что выражается в сильных колебаниях напряжения разряда и интенсивности излучения и приводит к переходу разряда к контрагированному типу, т. е. возникновению катодных пятен. Существенно иной характер влияния магнитного поля на стационарность горения вакуумной дуги ожидается в схеме с аксиальным магнитным полем.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-19-00716.

### 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*. 2020. V. 46(6). P. 611–616.
2. *Vorona N. A., Gavrikov A. V., Samokhin A. A., Smirnov V. P., Khomyakov Y. S.* On the possibility of reprocessing spent nuclear fuel and radioactive waste by plasma methods // *Phys. At. Nucl.* 2015. V. 78(14). P. 1624–1630.
3. *Муромкин Ю. А., Долголенко Д. А.* О разделении смесей химических элементов // *УФН*. 2017. Т. 187. № 10. P. 1071–1096.
4. *Liang H., Ming F., Alshareef H.* Applications of plasma in energy conversion and storage materials // *Advanced Energy Materials*. 2018. V. 8(29): 1801804.
5. *Brown I., Oks E.* Vacuum arc ion sources: recent developments and applications // *IEEE Trans. Plasma Sci.* 2005. V. 33(6). P. 1931–1943.

## Термодинамические свойства двухатомных соединений с аргоном в низкотемпературной плазме

*М. А. Мальцев<sup>1,2</sup>, И. В. Морозов<sup>1,2</sup>, Е. Л. Осина<sup>2</sup>, Ю. В. Миненков<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>3</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова РАН

Низкотемпературная плазма имеет обширное поле для применения в различных областях деятельности человека. Одним из важных и наукоемких применений свойств такой плазмы является масс-спектрометрический атомный анализ. Для определения атомного состава исследуемых объектов необходимо сначала разложить на составные части исследуемый образец, после чего ионизировать полученные компоненты. Из всего многообразия различных способов ионизации составных атомов выделяются газовые разряды и индуктивно-связанная плазма вследствие эффективности и надежности данных источников 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 концентрацию аргона, даже небольшая часть соединений Ar с другими компонентами плазмы может существенно влиять на получаемые масс-спектры [1].

Для количественного и качественного анализа распространенности соединений аргона (аргидов) в плазме необходимы данные об их термодинамических функциях. Расчет термодинамических функций двухатомных молекул традиционно основан на использовании молекулярных постоянных. Однако этот метод можно усовершенствовать, используя потенциал межатомного взаимодействия, исходя из экспериментальных данных или полученных квантово-химическими методами [2–5] (пример для молекулы  $\text{ArN}^+$  представлен на рис. 1).

В данной работе был проведен ряд квантово-химических расчетов методом многоссылочного конфигурационного взаимодействия (MRCI) с учетом спин-орбитального и спин-спинового взаимодействия двухатомных соединений аргона. Были получены потенциальные кривые межатомного взаимодействия для низколежащих электронных состояний. На основе полученных кривых были рассчитаны основные температурные зависимости термодинамических функций положительно заряженного нитрида аргона. Был проведено термодинамическое моделирование состава низкотемпературной плазмы на примере тлеющего разряда.

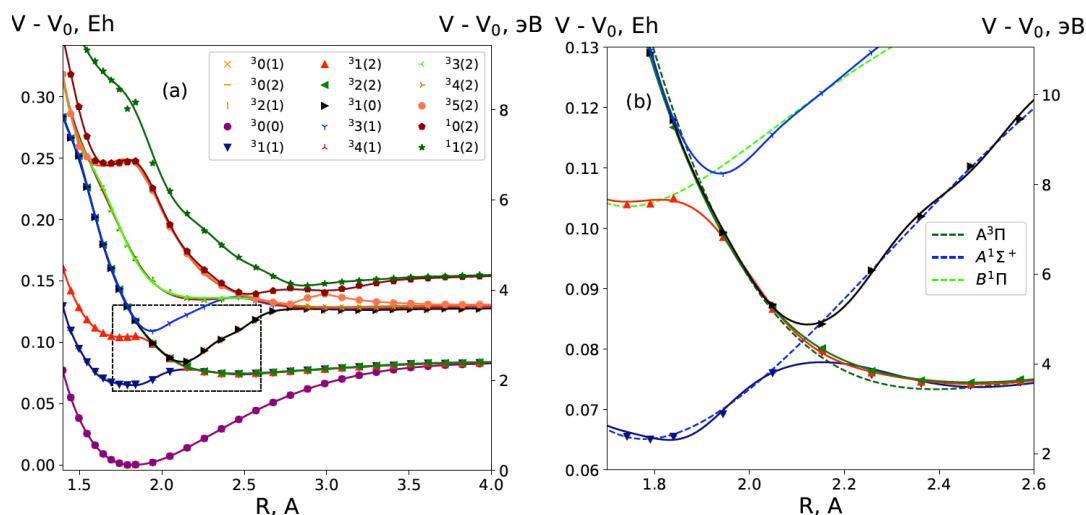


Рис. 1. Кривые потенциальной энергии основного и возбужденных состояний  $\text{ArN}^+$ , включая спин-спиновые и спин-орбитальные взаимодействия (точки на рисунке *a*). На рисунке *b* показана выбранная область графика с рисунка *a* в большем масштабе

### Литература

1. Witte T. M., Houk R. S. Metal argide ( $\text{MAr}^+$ ) ions are lost during ion extraction in laser ablation-inductively coupled plasma-mass spectrometry // Spectrochim. Acta, Part B. 2012. V. 69. P. 25–31.

2. Мальцев М. А., Осина Е. Л. Расчет термодинамических функций идеальных двухатомных газов // Вестник ОИВТ РАН. 2019. Т. 2. С. 41–43.
3. Мальцев М. А., Осина Е. Л., Морозов И. В. Термодинамические свойства димеров аргона  $\text{Ar}_2^+$  и  $\text{Ar}_2$  // Теплофизика высоких температур. 2019. Т. 57. № 1. С. 42–46.
4. Мальцев М. А., Осина Е. Л., Морозов И. В. Термодинамические свойства  $\text{ArH}^+$  и  $\text{ArH}$  // Теплофизика высоких температур. 2019. Т. 57. № 3. С. 367–370.
5. Maltsev M. A., Akseanova S. A., Morozov I. V., Minenkov Y., Osina E. L. Ab initio calculations of the interaction potentials and thermodynamic functions for  $\text{ArN}$  and  $\text{ArN}^+$  // J. Comput. Chem. 2023. V. 44(12). P. 1189–1198.

УДК 533.9.07

## Исследование особенностей инициации диффузной вакуумной дуги на катоде, моделирующем отработавшее ядерное топливо

Д. Е. Миронов<sup>1,2</sup>, Р. А. Усманов<sup>1,2</sup>, А. Д. Мельников<sup>1,2</sup>, В. П. Полищук<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Целью данной работы являлось экспериментальное установление параметров пробоя вакуумного промежутка и инициации вакуумной дуги на катоде, моделирующем отработавшее ядерное топливо (ОЯТ). Работа посвящена экспериментальному исследованию процесса пробоя разрядного промежутка и последующей инициации вакуумной дуги.

Данная работа являлась частью цикла исследований, направленных на разработку метода плазменной сепарации ОЯТ [1, 2]. Актуальность разработки этого метода обусловлена развитием концепции двухкомпонентной системы с тепловыми и быстрыми нейтронами в замкнутом ядерном топливном цикле (ЗЯТЦ) [3]. Развитие данной концепции ведет к увеличению темпов накопления ОЯТ. Переработка ОЯТ с целью повторного его использования — одно из направлений развития ЗЯТЦ. Существующие методы переработки ОЯТ имеют существенные недостатки: загрязнение среды переработки дополнительными радиоактивными отходами (РАО), высокие экономические издержки, необходимые для реализации этих методов. Плазменная сепарация перспективна для ЗЯТЦ как благодаря малому количеству вторичных РАО, так и благодаря меньшей стоимости переработки.

Важность вопроса инициации дугового разряда в разработке метода плазменной сепарации состоит в необходимости создания источника плазмы, понимания оптимальных режимов его работы, процессов выхода на рабочий режим. Одним из перспективных источников плазмы, применимых для целей плазменной сепарации, является диффузная вакуумная дуга [4]. Выбор этого типа дуги обусловлен практически полным отсутствием капельной фракции и меньшей в сравнении с дугой с контрагированными катодными пятнами плотностью тока дуги [4].

Экспериментальная установка представляла собой вакуумную камеру с остаточным давлением 10 мПа, выполненный из гадолиния катод, находившийся в тигле диаметром 24 мм, анод из молибдена толщиной 0,5 мм с отверстием диаметром 5 мм. Выбор катодного материала обусловлен близостью первых трех потенциалов ионизации гадолиния и урана [4]. В ходе эксперимента регистрировались следующие параметры: температура катода с помощью пирометра, осциллограммы пробоя вакуумного промежутка, ток дуги, процесс горения записывался на видео для последующей синхронизации данных и обработки результатов.

Проведен ряд экспериментов, в первой серии которых напряжение на промежуток подавалось при недостаточных для горения дугового разряда температурах катода, после чего катод нагревался до достаточных для дуги температур. В другой серии экспериментов катод разогревался до температур, при которых может существовать дуга, а затем подавалось напряжение и регистрировались параметры пробоя. В рамках первой серии экспериментов и подаче напряжения при температуре катода  $T_k \approx 1500^\circ\text{C}$  возникал тлеющий разряд, с дальнейшим нагревом увеличивалось давление паров гадолиния, разряд переходил в дугу с ДКП. При этом процесс перехода сопровождался ярким свечением близ анода. Это свечение, представленное на рис. 1, объясняется большой мощностью, выделяемой на аноде в переходном процессе, активным его испарением.

Во второй серии экспериментов анод имел водяное охлаждение, с помощью ФЭУ регистрировалась интенсивность излучения плазмы при пробое, а также варьировалась величина разрядного промежутка (25 и 45 мм). Зажигание происходило при достаточном давлении паров катодного материала (температура

катода  $T_k \approx 1700^\circ\text{C}$ ), возникала дуга. В этом эксперименте при инициации разряда на разных температурах была установлена зависимость напряжения пробоя от температуры катода. Оказалось, что с увеличением температуры катода напряжение пробоя монотонно падает, притом оценка тока термоэмиссии соответствует рабочему режиму дуги ( $\sim 50$  А) при зажигании на  $T_k \approx 1700^\circ\text{C}$ , что согласуется с результатами первой серии экспериментов. Зависимость напряжения пробоя от величины разрядного промежутка отсутствует. Это говорит о том, что длина свободного пробега электрона в рассматриваемых условиях меньше минимальной длины разрядного промежутка [5]. Зажиганию дуги предшествовала вспышка излучения плазмы длительностью порядка 1,5 мс, зарегистрированная ФЭУ. Характерное время установления рабочего режима при этом порядка 10 мс. Отсутствует зависимость установившейся температуры катода от температуры инициации — устанавливается температура  $\approx 1700^\circ\text{C}$ .

Полученные результаты полезны для понимания особенностей инициации вакуумного дугового разряда с ДКП в задачах плазменной сепарации ОЯТ. Выявлена граничная температура катода, позволяющая инициировать дугу и привести ее в рабочий режим —  $1700^\circ\text{C}$ . Установлено, что напряжение пробоя с увеличением температуры катода падает, не зависит от величины разрядного промежутка в диапазоне 25–45 мм и вследствие пробоя катод нагревается потоком электронов до температур, соответствующих рабочему режиму. Получено характерное время выхода на рабочий режим  $\approx 10$  мс.

340 В	320 В	290 В	275 В	40 В	30 В	1,2 В
1 А	2 А	10 А	30 А	47 А	50 А	51 А

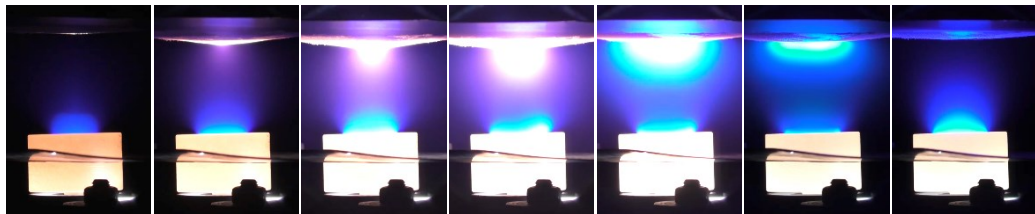


Рис. 1. Процесс перехода от тлеющего разряда к дуговому

### Литература

1. *Dolgolenko D. A., Muromkin Y. A.* Separation of mixtures of chemical elements in plasma // *Physics-Uspekhi*. 2017. V. 60(10). P. 994–1017.
2. *Zweben S. J., Gueroult R., Fisch N. J.* Plasma mass separation // *Physics of Plasmas*. 2018. V. 25(9): 090901.
3. *Алексеев П. Н.* [и др.]. Двухкомпонентная ядерная энергетическая система с тепловыми и быстрыми реакторами в замкнутом ядерном топливном цикле / Под ред. Н. Н. Пономарева-Степного. — М.: Техносфера, 2016.
4. *Полищук В. П.* [и др.]. Вакуумные дуговые разряды с диффузной катодной привязкой (обзор) // *Теплофизика высоких температур*. 2020. Т. 58. № 4. С. 515–535.
5. *Райзер Ю. П.* Физика газового разряда. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987.

УДК 539.89+519.6

### Зависимость показателя преломления монокристалла LiF в диапазоне давлений до 150 ГПа

*Е. И. Несмиянов, Я. Е. Стариков, Е. С. Шестаковская, А. Я. Лейви*

Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)

Монокристалл фторид лития оптически прозрачен при давлениях до  $\sim 150$  ГПа. Данное оптическое свойство позволяет использовать монокристалл в качестве оконного материала при исследовании свойств различных материалов при экстремальных нагрузках. Таким образом, математическое моделирование экспериментов по ударно-волновому нагружению фторида лития для уточнения его оптических свойств при высоких давлениях является актуальной задачей.

Система законов сохранения для описания упругопластических течений в лагранжевых координатах для одномерного случая имеет вид

$$\dot{\rho} = -\rho \frac{\partial v}{\partial z}, \quad \rho \dot{v} = \frac{\partial}{\partial z}(S_{zz} - P), \quad \rho E = (-P + S_{zz}) \frac{\partial v}{\partial z}, \quad \dot{S}_{zz} = \frac{4\mu}{3} \frac{\partial v}{\partial z}, \quad (1)$$



где  $\rho$  — плотность,  $v$  — скорость,  $P$  — давление,  $S_{zz}$  —  $z$ -компонента тензора дивергента напряжений,  $E$  — внутренняя энергия единицы массы,  $\mu$  — модуль сдвига.

Монокристалл фторида лития в рассматриваемом диапазоне массовых скоростей обладает в основном упругими свойствами, поэтому для описания упругопластических течений применяется модель Мизеса [1].

Для замыкания системы (1) разработано уравнение состояния монокристалла фторида лития в форме Ми–Грюнайзена:

$$P = P_x + \frac{\Gamma(V)}{V}(E - E_x),$$

где  $P_x$  и  $E_x$  — холодные части давления и энергии — определяются в виде, приведенном в [2], коэффициент Грюнайзена — в [3].

Для численного решения предложенной математической модели использовался метод Куропатенко [4]. Верификация математической модели проводилась по экспериментальным данным [5], в которых моделируется удар пластины из меди по образцу из фторида лития. На рис. 1 представлены результаты численного моделирования эксперимента в гидродинамическом приближении и с учетом модели Мизеса.

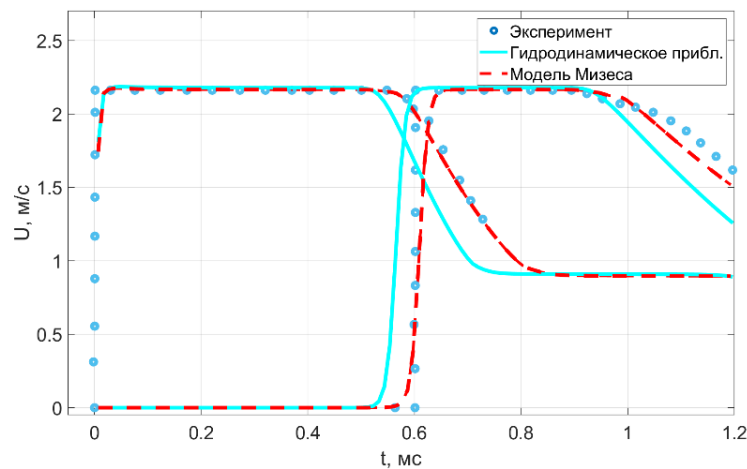


Рис. 1. Профили массовой скорости на передней и тыльной поверхностях образца при скорости удара  $w_{Cu} = 3150$  м/с: точки соответствуют эксперименту [6], сплошная линия — расчет в гидродинамическом приближении, штриховая — расчет с учетом модели Мизеса

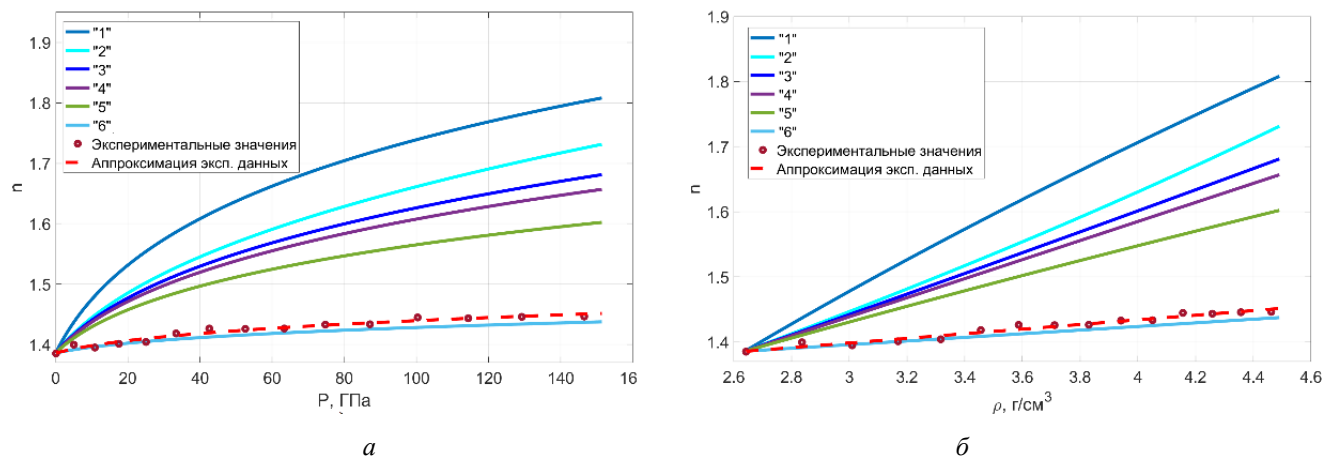


Рис. 2. Зависимость показателя преломления фторида лития от давления (а); плотности (б)

Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показало, что построенная математическая модель дает правильное описание ударно-волновых процессов в монокристалле фторида лития. Для расчетов показателя преломления используются параметры на фронте ударной волны; математическое моделирование показало, что они практически совпадают для гидродинамического приближения и с учетом модели упругопластичности Мизеса.

Значения показателя преломления находятся в виде зависимости  $n - \rho$  по экспериментальным данным [6], варьируя скорость налетающего ударника из меди в диапазоне скоростей от 10 м/с до 7000 м/с.

Связь между показателем преломления  $n$  и плотностью  $\rho$  может быть найдена по одному из шести известных уравнений [7, 8]:

$$n = n_0 \sqrt{\frac{\rho}{\rho_0}}, \quad (1) \quad \frac{n-1}{\rho} = \text{const}, \quad (4)$$

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2\rho} = \text{const}, \quad (2) \quad \frac{n^2 - 1}{\rho} = \text{const}, \quad (5)$$

$$\frac{n^2 - 1}{n + 0,4\rho} = \text{const}, \quad (3) \quad n = n_0 + \frac{dn}{d\rho}(\rho - \rho_0). \quad (6)$$

Далее было проведено численное моделирование экспериментов по ударно-волновому нагружению фторида лития в диапазоне давлений от 1 ГПа до 153 ГПа. При более высоких давлениях, согласно [6], происходит плавление кристалла.

На рис. 2 представлено сравнение результатов численного исследования и экспериментальных данных. Видно, что наиболее удовлетворительно описывает экспериментальные данные зависимость (6) с погрешностью, не превышающей 5%.

### Литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. — М: Наука, 1987.
2. Баум Ф. А., Станюкович К. П., Шехтер Б. И. Физика взрыва. — М.: Физматгиз, 1959.
3. Ковалев Ю. Определение вида коэффициента Грюнайзена для молекулярных кристаллов // Доклады Академии наук. 2005. Т. 403. С. 475–477.
4. Куропатенко В. Ф. Об одном разностном методе расчета ударных волн // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1963. Т. 3. С. 201–204.
5. Liu Q., Zhou X., Zeng X., Luo S. N. Sound velocity, equation of state, temperature and melting of LiF single crystals under shock compression // J. Appl. Phys. 2015. V. 117(4): 045901.
6. Young G., Liu X., Leng C., Yang J., Huang H. Refractive index of [100] lithium fluoride under shock pressures up to 151 GPa // AIP Advances. 2018. V. 8: 125310.
7. Ананьев С. С., Берналь И. Д., Демидов Б. А., Калинин Ю. Г. Петров В. А. Экспериментальные измерения показателя преломления полиметилметакрилата за фронтом ударной волны, возбуждаемой сильноточным электронным пучком // Журнал технической физики. 2010. Т. 80. С. 111–116.
8. Ильяев Р. И. Михайлов А. Л., Жерноклетов М. В. Экспериментальные методы и средства в физике экстремальных состояний вещества. — М: Наука, 2021.

УДК 533.9.072

### Масс-спектр плазменного сепаратора с аксиально симметричным распределением потенциала

*А. П. Ойлер<sup>1,2</sup>, Г. Д. Лизякин<sup>2</sup>, А. В. Гавриков<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Плазменная масс-сепарация является современным методом разделения веществ, в результате которого не образуется жидких отходов, которые затруднительно утилизировать. Как показали недавние экспериментальные работы [1], при сепарации ионов в отражательном разряде с термоэмиссионным катодом области осаждения разных элементов частично перекрываются. Перекрытие возникает в результате увеличения поперечного сечения пучков компонентов смеси. Среди возможных факторов, увеличивающих такого рода дисперсию, могут быть: разброс частиц по начальным скоростям и энергиям, искажения профиля потенциала в результате инъекции, а также флуктуации потенциала плазмы [2, 3].

В данной работе исследовалось, как в одном и том же аксиально симметричном потенциале будут двигаться частицы с разным значением отношения заряда  $Z$  к массе  $M$ . Для этого рассматривался

аксиально симметричный плазменный столб, в котором магнитное поле  $\vec{B}$  направлено вдоль оси симметрии, а электрическое поле  $\vec{E}$  перпендикулярно к нему (рис. 1). Частица начинает движение с положения, задаваемого вектором  $\vec{r}_0$  и со скоростью  $\vec{v}_0$ .

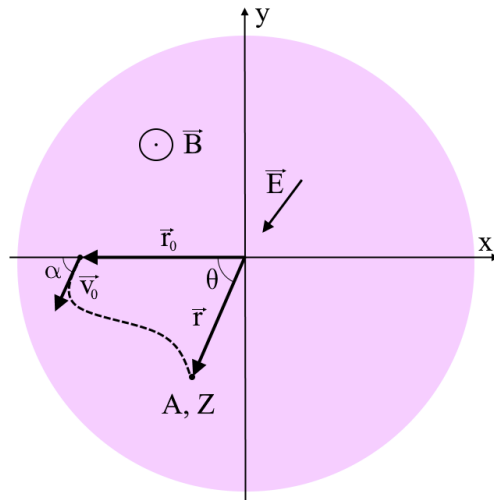


Рис. 1. Обозначения для математической задачи

Обезразмеренная система уравнений движения выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \ddot{\rho} - \rho\dot{\theta}^2 = -\frac{A}{Z} \frac{d\Phi}{d\rho} + \rho\dot{\theta}; \\ \rho\ddot{\theta} + 2\dot{\rho}\dot{\theta} = -\dot{\rho}. \end{cases} \quad (1)$$

Начальные условия:

$$\begin{cases} \theta(0) = 0, & \dot{\theta}(0) = \frac{\eta\sqrt{A}}{Z} \sin \alpha, \\ \rho(0) = 1, & \dot{\rho}(0) = \frac{\eta\sqrt{A}}{Z} \cos \alpha, \\ \Phi(1) = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Безразмерные переменные:

$$\tau = \frac{eB}{m_p} t, \quad \rho = \frac{r}{r_0}, \quad \Phi = \frac{\varphi}{\varphi_0} = \varphi \left( \frac{eB^2 r_0^2}{m_p} \right)^{-1}, \quad \eta = \frac{\sqrt{2m_p T_0}}{eBr_0}. \quad (3)$$

Здесь  $e$  и  $m_p$  — заряд и масса протона,  $T_0$  — начальная кинетическая энергия иона в поперечном к магнитному полю направлении. Далее в работе рассматривался случай однозарядных ионов  $Z1$ . В результате была получена интегральная связь дисперсионной кривой с радиальной зависимостью потенциала:

$$\theta(A, \eta) = \int_{\rho_p(A, \eta)}^1 \frac{(1 + 2\eta\sqrt{A} \sin \alpha - \rho^2) d\rho}{\sqrt{A(\eta^2 - 2\Phi(\rho))\rho^4 - \frac{\rho^2}{4}(1 + 2\eta\sqrt{A} \sin \alpha - \rho^2)^2}}. \quad (4)$$

Здесь  $\rho_p(A, \eta)$  — зависимость радиальной координаты перицентра траектории иона от его массового числа и начальной энергии ионов. При нулевой начальной энергии ионов  $T_0 = 0$  эВ выражение (4) сводится к обратному преобразованию Абеля:

$$\theta(A, 0) = -\frac{2\pi}{\sqrt{A}} \left[ -\frac{1}{\pi} \int_{\frac{1}{\sqrt{A}}}^{\infty} \frac{(\ln \rho_p(y^{-2}, 0))'_y dy}{\sqrt{y^2 - 1/A}} \right] = -\frac{2\pi}{\sqrt{A}} F_{\text{Abel}}^{-1} \left[ \ln \rho_p \left( \frac{1}{y^2}, 0 \right) \right] \left( \frac{1}{\sqrt{A}} \right), \quad (5)$$

Отсюда была получена связь, с помощью которой можно по желаемой дисперсионной зависимости получить требуемое для этого распределение потенциала:

$$\Phi(\rho) = -\frac{\rho^2}{8} \left( \frac{1}{\rho^2} - 1 \right)^2 \rho_p^{-1}(\rho), \quad \ln \rho_p(z, 0) = -\frac{1}{2\pi} F_{\text{Abel}} \left[ \frac{1}{y} \theta \left( \frac{1}{y^2}, 0 \right) \right] (\sqrt{z}). \quad (6)$$

Также в рамках данной работы было найдено аналитическое выражение в квадратурах для линейной поправки по параметру  $\eta$ :

$$\theta(A, \eta) \approx \theta(A, 0) + \frac{\partial \theta}{\partial \eta}(A, 0) \eta.$$

Пусть  $P(\rho) = \rho_p^{-1}(\rho, 0)$ , тогда

$$\frac{\partial \theta}{\partial \eta}(A, 0) = \int_{\rho_p(A, 0)}^1 \frac{4\sqrt{A} \sin \alpha}{(AP(\rho) - 1)^{3/2}} \left( \frac{AP(\rho)}{\rho(1 - \rho^2)} - \frac{P'(\rho)}{P'(\rho_p(A, 0))\rho_p(A, 0)(1 - \rho_p(A, 0)^2)} \right) d\rho. \quad (7)$$

Исходя из этого выражения, был сформулирован критерий существования диапазона принципиально разделяемых масс: ионы с атомной массой  $A$  принципиально делимы  $\Leftrightarrow$

$$P'(\rho_p(A, 0)) \neq 0. \quad (8)$$

Исследование было выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-19-00716.

### 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 Phys. Controlled Fusion*. 2021. V. 63(3): 032002.
2. *Liziakin G.* [et al.]. Plasma mass separation in configuration with potential well // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2021. V. 54(41): 414005.
3. *Liziakin G., Gavrikov A., Smirnov V.* Negative electric potential in a cylindrical plasma column with magnetized electrons // *Plasma Sources Sci. Technol.* 2020. V. 29(1): 015008.

УДК 536.7

## Первопринципное исследование тугоплавких металлов в околокритическом состоянии

*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 материалов атомной энергетики, их уравнений состояния (УРС) крайне необходимо для анализа ядерной безопасности и моделирования поведения атомных реакторов при критических воздействиях. Однако их свойства в околокритической области до сих пор известны лишь приблизительно.

Область жидкой фазы вещества и сверхкритическое состояние могут быть достигнуты в экспериментах по адиабатическому расширению [1]. Однако доступно только несколько измерений температуры в сжатых металлах [2], а также аналогичные измерения в волнах изэнтропического расширения [3]. Кроме того, особое значение имеют термодинамически полные данные, полученные с использованием метода изобарического расширения (ИЕХ). Однако интерпретация экспериментов ИЕХ часто затруднена из-за скорости и сложности происходящих физических явлений [4–7]. Этот факт может объяснить часто встречающееся несоответствие между экспериментальными данными по изобарическому расширению для некоторых металлов, что ярко наблюдается для тугоплавких, в том числе для вольфрама, молибдена и циркония. Эти металлы имеют большое значение из-за их уникальных свойств: высокой механической прочности, высокой температуры плавления, исключительной стойкости к нагреву и коррозии, а также хорошей электропроводности. Однако высокая температура плавления затрудняет измерение их теплофизических свойств.

В связи с этим в данной работе мы представляем результаты первопринципных расчетов методом квантовой молекулярной динамики (КМД), которые позволили выполнить оценку параметров критических точек вольфрама, молибдена и циркония, положения кривых 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) [8], но также учитывает движение ионов. В настоящее время в расчетах могут использоваться более 1000 атомов [9–11], что позволяет изучать неупорядоченные системы и даже фазовые переходы [9, 11]. Это делает КМД перспективным методом для описания высокотемпературных свойств циркония в широком диапазоне параметров. Для выполнения первопринципного моделирования использовался программный код VASP [12].

В данной работе на основе табличного УРС из расчетов КМД были восстановлены критические изобары вольфрама, молибдена и циркония и, таким образом, выполнена оценка кривых сосуществования жидкость–газ на фазовых диаграммах. Критические параметры КМД вольфрама близки к оценке Гесса [13], полученной с помощью соотношения подобия Ликальтера; молибдена — к оценке Зайделя и Фюке [14], полученной путем импульсного нагрева металлических проволочных образцов; циркония — к оценке Мартынюка [15] по закону соответствующих состояний (правило Гульдберга). Полученные новые данные помогут улучшить существующие определяющие соотношения для этих металлов, исключив неопределенность в их теплофизических свойствах при высоких температурах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 20-79-10398).

### Литература

1. *Al'tshuler L. V., Bushman A. V., Zhernokletov M. V.* [et al.]. Unloading isentropes and the equation of state of metals at high energy densities // *Sov. Phys. JETP*. 1983. V. 51(2). P. 373–383.
2. *Yoo C. S., Holmes N. C., Ross M.* [et al.]. Shock temperatures and melting of iron at Earth core conditions // *Phys. Rev. Lett.* 1993. V. 70. P. 3931–3934.
3. *Avrarin E. N., Vodolaga B., Simonenko V. A., Fortov V. E.* Intense shock waves and extreme states of matter // *Physics-Uspokhi*. 1993. V. 36(5). P. 337–364.
4. *Rousskikh A. G., Baksh R. B., Chaikovskiy S. A.* [et al.]. The effects of preheating of a fine tungsten wire and the polarity of a high-voltage electrode on the energy characteristics of an electrically exploded wire in vacuum // *IEEE Trans. Plasma Sci.* 2006. V. 34(5). P. 2232–2238.
5. *Tkachenko S. I.* On the homogeneity of a conductor heated by electric current pulse // *Tech. Phys. Lett.* 2002. V. 28(8). P. 637–639.
6. *Tkachenko S. I.* Simulation of the heating of a tungsten conductor by a nanosecond high-power current pulse // *High Temp.* 2001. V. 39(2). P. 195–198.
7. *Rousskikh A. G., Baksh R. B., Labetskii A. Y.* [et al.]. Electric explosion of fine tungsten wires in vacuum // *Plasma Phys. Rep.* 2004. V. 30(11). P. 944–952.
8. *Martin R. M.* Electronic structure: basic theory and practical methods. — Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
9. *Hern'andez E. R., Rodriguez-Prieto A., Bergara A., Alf'e D.* First-principles simulations of lithium melting: stability of the bcc phase close to melting // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 104: 185701.
10. *Pozzo M., Desjarlais M. P., Alf'e D.* Electrical and thermal conductivity of liquid sodium from first-principles calculations // *Phys. Rev. B*. 2011. V. 84: 054203.
11. *Pozzo M., Alf'e D.* Melting curve of face-centered-cubic nickel from first-principles calculations // *Phys. Rev. B*. 2013. V. 88: 024111.
12. *Kresse G., Hafner J.* Ab initio molecular dynamics for liquid metals // *Phys. Rev. B*. 1993. V. 47. P. 558–561.
13. *Hess H., Kloss A., Rakhel A., Schneidenbach H.* Determination of thermophysical properties of fluid metals by wire-explosion experiments // *Int. J. Thermophys.* 1999. V. 20(4). P. 1279–1288.
14. *Seydel U., Fucke W.* Experimental determination of critical data of liquid molybdenum // *J. Phys. F: Met. Phys.* 1978. V. 8(7). P. L157–L161.
15. *Martynuk M.* Analysis of the temperature dependence of the density of liquid metals on the basis of the law of corresponding states // *Zh. Fiz. Khim.* 1984. V. 58(8). P. 1896–1899.

## Факторы, влияющие на длину продольно-поперечного разряда в сверхзвуковом потоке воздуха

*Е. Е. Перевощиков, А. А. Фирсов*

Объединенный институт высоких температур РАН

Значительный интерес к электрическим разрядам в высокоскоростных потоках обусловлен поиском методов управления потоком и интенсификации горения. Продольно-поперечный разряд — это классический дуговой разряд постоянного тока между двумя электродами, который уносится из межэлектродной области под действием некоторой силы в поперечном направлении. В классической дуге с горизонтальной ориентацией оси между электродами такой силой является тепловая конвекция. Также альтернативным вариантом может быть воздействие внешнего магнитного поля. При определенном соотношении параметров разряда и воздействия на него, его канал простирается вдоль направления воздействия на значительные расстояния, превышающие межэлектродное расстояние более чем на порядок. Однако в наблюдаемых экспериментах существует определенная предельная длина петли канала, после чего наблюдается перепробой — пробой газа между элементами канала, сильно сокращающий его длину.

Было исследовано влияние конфигурации электродов и тока разряда на его длину и напряжение, а также на динамические параметры возникновения нового токового канала. Было показано, что при увеличении тока разряда на единицу длины разряда приходится меньшее напряжение, а при рассмотренных токах длина разряда и напряжение связаны линейной зависимостью. Случаи перепробоя не имеют какой-то выделенной частоты, однако время между ними имеет статистический максимум и изменяется в зависимости от тока разряда и расстояния между электродами. Увеличение межэлектродного расстояния приводит к увеличению максимальной длины разряда, а также его длины сразу после перепробоя, и уменьшению частоты перепробоев; та же тенденция наблюдается в [1]. Увеличение тока разряда также приводит к увеличению длины разряда и уменьшению частоты перепробоев: из-за падающей вольт-амперной характеристики (показано в [2]) максимальное напряжение на разряде уменьшается, и для достижения напряжения перепробоя требуется большая длина петли; было экспериментально подтверждено, что скорость перемычки разряда совпадает со скоростью слоя потока, в котором находится, что согласуется с результатами [3], а так как при увеличении тока перемычка уносится на большее расстояние, то возрастает время между перепробоями.

Результаты данной работы, подробно изложенные в [4], могут быть использованы для выбора разряда с оптимальными параметрами в задачах плазменной аэродинамики и плазменно-стимулированного горения.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 21-79-10408.

### Литература

1. *Logunov A. A., Kornev K. N., Shibkova L. V., Shibkov V. M.* Influence of the interelectrode gap on the main characteristics of a pulsating transverse-longitudinal discharge in high-velocity multicomponent gas flows // *High Temp.* 2021. V. 59. P. 19–26. DOI: 10.1134/S0018151X21010119.
2. *Firsov A., Bityurin V., Tarasov D., Dobrovolskaya A., Troshkin R., Bocharov A.* Longitudinal DC discharge in a supersonic flow: numerical simulation and experiment // *Energies (Basel)*. 2022. V. 15(19):7015. DOI: 10.3390/en15197015.
3. *Ershov A. P., Kamenshchikov S. A., Kolesnikov E. B., Logunov A. A., Firsov A. A., Chernikov V. A.* The possibility of measuring flow velocity using a low-intensity periodic pulse discharge // *Fluid Dynamics* 2008. V. 43. P. 605–612. DOI: 10.1134/S0015462808040133.
4. *Perevoshchikov E. E., Firsov A. A.* Influence of current and interelectrode gap on characteristics of longitudinal-transverse discharge in a supersonic airflow // *Plasma Phys. Rep.* 2023. V. 49(5). P. 634–639.

## Экспериментальное исследование кинетического разогрева микрочастиц, вызванного нарушением симметрии взаимодействия в газоразрядной плазме

*Э. А. Саметов<sup>1,2</sup>, Е. А. Лусин<sup>1,2</sup>, Е. А. Кононов<sup>1,2</sup>, О. С. Ваулина<sup>1,2</sup>, М. М. Васильев<sup>1,2</sup>, О. Ф. Петров<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Одна из экспериментально наблюдаемых особенностей лабораторной пылевой плазмы — это высокая кинетическая энергия микрочастиц 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.

Указанные механизмы нагрева пылевой компоненты рассмотрены для систем с взаимным межчастичным взаимодействием. Эти модели не объясняют некоторых особенностей перераспределения тепловой энергии в наблюдаемых пылевых структурах, таких как, например, увеличение (или уменьшение) кинетической температуры микрочастиц в направлении потока ионов и неравновесное распределение тепловой энергии между степенями свободы. Невзаимный тип взаимодействия между пылевыми частицами может иметь место в плазме с ионным потоком (из-за эффекта ионной фокусировки), а также из-за сил затенения нейтралами для частиц с различной температурой поверхности. В работе [1] был теоретически описан механизм кинетического разогрева частиц и перераспределения их кинетической энергии для дисперсных систем разной природы за счет работы эффективных сил межчастичного взаимодействия.

Средняя эффективная кинетическая температура, приходящаяся на  $\xi$ -ю степень свободы частицы в системе частиц с нарушением симметрии взаимодействия, может быть записана как

$$T_{\text{eff}}^{(\xi)} = T^{(\xi)} + \delta T^{(\xi)}, \quad (1)$$

где  $T^{(\xi)}$  — эффективная температура, характеризующая интенсивность теплового источника, действующего на одиночную микрочастицу (при отсутствии влияния со стороны соседней частицы);  $\delta T^{(\xi)} = 2\delta K^{(\xi)}$ ,  $\delta K^{(\xi)}$  — дополнительная кинетическая энергия, которую частица приобретает за счет работы невзаимных межчастичных сил. Относительное изменение температуры за счет дополнительной подкачки энергии в систему определяется следующим соотношением [1]:

$$\delta T^{(\xi)} = \frac{(f_{21}^{(\xi)} - f_{12}^{(\xi)})^2}{(f_1^{(\xi)} - f_2^{(\xi)} - f_{21}^{(\xi)} + f_{12}^{(\xi)})^2 + 4f_{21}^{(\xi)}f_{12}^{(\xi)} + 2v^2(f_1^{(\xi)} + f_2^{(\xi)} - f_{21}^{(\xi)} - f_{12}^{(\xi)})}, \quad (2)$$

где  $f_{ij}^{(\xi)}$  — производная удельной силы  $F_{ij}/M$ , действующей на  $j$ -ю частицу с массой  $M$  от  $i$ -й,  $f_j^{(\xi)}$  — производная удельной удерживающей силы  $F_j/M$ , действующая на  $j$ -ю частицу из страты, а  $v$  — коэффициент трения частиц в среде. В рамках этой модели, чтобы определить величину дополнительно подкачиваемой энергии, достаточно измерить коррелятор скоростей частиц, поскольку [2]

$$\delta T^{(\xi)} = M \langle V_1^{(\xi)} V_2^{(\xi)} \rangle, \quad (3)$$

где угловые скобки означают усреднение по времени.

С целью изучения механизма кинетического разогрева пылевых частиц в газоразрядной плазме были проанализированы результаты эксперимента с уединенной частицей и с парой частиц. 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) с монодисперсными частицами полистирола диаметром 4,6 мкм. При анализе данных использовался новый экспериментальный метод [3], основанный на анализе спектральной плотности случайных процессов. Аппроксимация экспериментальных данных аналитическими функциями [3] позволяет получить производные сил, действующих на частицы, коэффициент трения частиц и температуры, количественно характеризующие интенсивность теплового источника в газовом разряде. Этот метод не требует каких-либо внешних возмущений и специальной конструкции экспериментальной установки, предварительных измерений внешних полей и предположений о типе взаимодействия.

Эксперимент проводился в два этапа. На первом этапе для каждого из выбранных значений силы тока разряда была получена траектория уединенной микрочастицы. На втором этапе были вброшены две новые частицы, которые выровнялись вертикально вдоль оси газоразрядной трубки. Были получены траектории двух взаимодействующих частиц при тех же значениях силы тока. Анализ полученных траекторий с помощью плотности вероятностей скоростей частиц  $PDF(V)$  ( $PDF$  — probability density function) и спектров колебаний дает нам информацию о силах, действующих на частицы, их коэффициентах трения, эффективных кинетических температурах и корреляторах скоростей, а также температурах, количественно определяющих интенсивность тепловых источников.

На рис. 1 приведены температуры, количественно определяющие тепловые источники, действующих на частицы, полученные в результате фитирования спектральных плотностей аналитическими функциями. Средняя интенсивность поступательного шума, воздействующего на частицу в системе двух частиц, до 1,5 раз выше, чем интенсивность шума для одиночной частицы той же массы и при тех же параметрах газового разряда. На рис. 1 также приведены средние эффективные кинетические температуры, измеренные с помощью  $PDF(V)$ . Средняя эффективная кинетическая температура (на одну частицу)  $T_{\text{eff}}^{(X)}$  в паре частиц  $\sim$  в 5 раз выше кинетической температуры одиночной частицы  $T_0^{(X)}$  (при той же массе и при тех же параметрах газового разряда). Следовательно, доминирующим механизмом разогрева микрочастиц в цепочечных структурах в газовом разряде можно считать работу эффективных сил межчастичного взаимодействия.

Таким образом, разработанная ранее модель кинетического разогрева системы двух взаимодействующих частиц была экспериментально проверена с использованием нового спектрального метода. Показано, что доминирующим механизмом разогрева пылевых частиц в плазме газового разряда с потоком ионов действительно является работа эффективных сил межчастичного взаимодействия.

Данная работа была поддержана Российским научным фондом (грант № 19-12-00354).

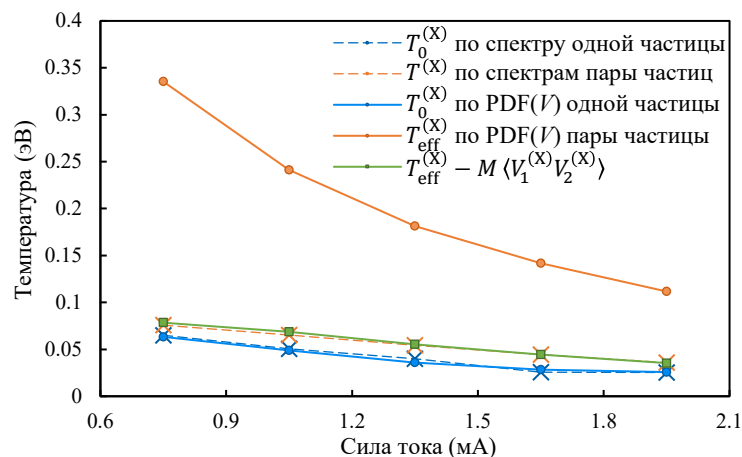


Рис. 1. Эффективные кинетические температуры (отмечены кружками ●), измеренные с помощью  $PDF(V)$ , и температуры, определяющие среднюю интенсивность тепловых источников (×), полученные с помощью спектрального анализа, для одиночной частицы (синий) и двух несимметрично взаимодействующих частиц (оранжевый) в зависимости от силы разрядного тока. Вычитание  $M \langle V_1^{(X)} V_2^{(X)} \rangle$  из  $T_{\text{eff}}^{(X)}$  показано зелеными квадратами

## Литература

1. Ваулина О. С., Лисина И. И., Лисин Е. А. Особенности энергетического обмена в системах частиц с непопарным взаимодействием // ЖЭТФ. 2015. Т. 148. № 4. С. 819–830.
2. Lisina I. I. [et al.]. Self-confined particle pairs in complex plasmas // Phys. Rev. E. 2017. V. 95(1): 013202.
3. Lisin E. A. [et al.]. Experimental study of the nonreciprocal effective interactions between microparticles in an anisotropic plasma // Sci. Rep. 2020. V. 10(1): 13653.



## Активное броуновское движение частиц в квазиодномерных (цепочечных) структурах при воздействии лазерного излучения

А. С. Светлов<sup>1,2</sup>, Е. А. Кононов<sup>1,2</sup>, О. Ф. Петров<sup>1,2</sup>, М. М. Васильев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Активными броуновскими принято считать частицы, которые могут преобразовывать энергию окружающей среды в энергию собственного направленного движения [1, 2]. Активные частицы могут двигаться как независимо, так и проявлять коллективный характер [3]. Средняя кинетическая энергия активных частиц может значительно превосходить среднюю кинетическую энергию (температуру) окружающей среды, что свидетельствует о значительной неравновесности процесса [1]. Примером активных частиц являются многие бактерии, подвижные клетки [3], микро- и нанороботы, пылевые частицы в разрядной плазме и сверхтекучем гелии.

Представлены результаты экспериментального исследования динамики цепочечных структур в тлеющем разряде постоянного тока при воздействии лазерного излучения. Структуры формировались активными броуновскими частицами. Использовались два типа сферических монодисперсных частиц меламин-формальдегида (МФ): полностью покрытые медью и янус-частицы (покрытые медью наполовину). Поглощение лазерного излучения металлической поверхностью частиц приводило к нагреву их поверхности и возникновению термофоретической силы. В результате этого наблюдалось более интенсивное движение микрочастиц.

Для регистрации частиц использовалась высокоскоростная видеокамера. В результате обработки экспериментальных видеоданных для каждой частицы в структурах были получены: траектории, зависимости средних квадратичных смещений, распределения средних скоростей в радиальном и вертикальном направлениях, средняя кинетическая энергия.

Экспериментально показано, что воздействие лазерного излучения на квазиодномерные (цепочечные) структуры влияет по-разному на структуры из полностью покрытых и из янус-частиц. С увеличением интенсивности лазерного излучения увеличивалась средняя кинетическая энергия пылевых частиц. Для Янус частиц это изменение было немонотонным.

Структура из полностью покрытых частиц на протяжении всего эксперимента сохраняла свою целостность, частицы не меняли свое положение и не покидали ловушку. Полностью покрытые частицы движутся в основном в радиальном направлении, увеличивая «диаметр» (крайние положения от центра) вращения.

Положение янус-частиц в структуре менялось, а также они покидали ловушку стратифицированного ДС-разряда. Структура из янус-частиц показала себя как более активная и неравновесная по сравнению с полностью покрытыми частицами. Это обусловлено анизотропией свойств таких частиц, так как их поверхность покрыта медью лишь наполовину.

### Литература

1. Арансон И. С. Активные коллоиды // УФН. 2013. Т. 183. № 1. С. 87–102
2. Bechinger C., DiLeonardo R., Löwen H., Reichhardt C., Volpe G. Active particles in complex and crowded environments // Rev. Mod. Phys. 2016. V. 88(4): 045006.
3. Selmečzietal D. [et al.]. Cell motility as random motion: A review // Eur. Phys. J. Spec. Top. 2008. V. 157(1). P. 1–15.

## Применение модифицированного метода TCSPC для изучения развития поверхностного барьерного разряда

И. В. Селивонин<sup>2</sup>, С. Е. Кувардин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Метод подсчета одиночных фотонов с корреляцией по времени (TCSPC) традиционно используется для спектроскопии одиночных молекул, флуоресцентной корреляционной спектроскопии, диффузной оптической томографии и т. д. [1] В классической конфигурации метод TCSPC представляет собой пару оптических детекторов (фотоумножителей) и электронный блок, на выходе которого исследователь получает статистические данные о сигнале.

В настоящей работе метод TCSPC был модифицирован с исключением электронного блока и заменой его на обработку сигнала с помощью автоматического обработчика в среде MATLAB, что позволило произвести не только постобработку сигнала, но и его предварительную фильтрацию и разделение по заданным параметрам.

В настоящей работе вышеуказанным методом исследовался разряд в асимметричной поверхностной конфигурации «кромка–плоскость». Диэлектрическим барьером выступала алундовая керамика толщиной 1 мм и диэлектрической проницаемостью 10. В качестве материалов исследуемых электродов выступали медная и алюминиевая фольги толщиной 20 мкм. Эксперименты проводились в неподвижном комнатном воздухе при атмосферном давлении. Питание электрода осуществлялось синусоидальным напряжением амплитудой 7 кВ и частотой 17 кГц.

Изображение разряда было спроецировано в масштабе 6 : 1 на пару фотоумножителей с помощью объектива и светоделительного кубика. Перед ФЭУ были установлены диафрагмы диаметром 0,6 мм. Первый ФЭУ, названный опорным, был направлен в приэлектродную область разряда. Вторым ФЭУ, названный предметным, мог перемещаться вдоль области развития разряда. Оптическая схема помещалась в бокс, закрытый от внешних источников света, так, что частота регистрации не связанных с развитием разряда фотонов не превышала  $10\text{ с}^{-1}$ . Оптическая схема реализации метода представлена на рис. 1.

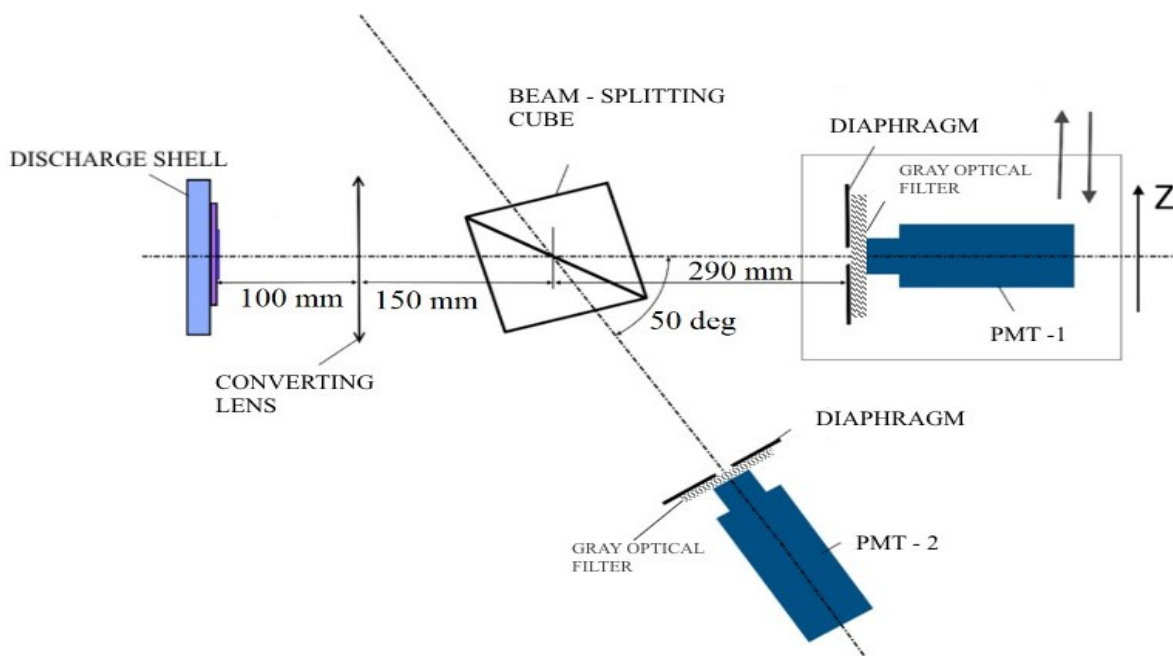


Рис. 1. Оптическая схема реализации метода TCSPC

Результатами обработки данных с помощью программы обработчика стали пространственно-временные диаграммы светимости разряда для алюминиевого (рис. 2) и медного (рис. 3) электродов с разделением по фазе питающего напряжения. Из полученных диаграмм были получены величины скорости распространения фронта плазмы для положительной и отрицательной полярности питающего напряжения. Для алюминиевого электрода скорость составила  $3 \cdot 10^5$  м/с для отрицательной полярности и

$5 \cdot 10^5$  м/с для положительной полярности. Для медного электрода скорости составили  $2,4 \cdot 10^5$  м/с для отрицательной полярности и  $5,7 \cdot 10^5$  м/с для положительной полярности. Полученные данные согласуются с данными других групп [2]. Временное разрешение метода, оцененное по времени нарастания интегрального импульса светимости, составило 300 пс (уровень 20–80%). Данное значение оказалось выше как временного разрешения отдельного ФЭУ (около 15 нс), так и временного разрешения используемого осциллографа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание № 075-01056-22-00).

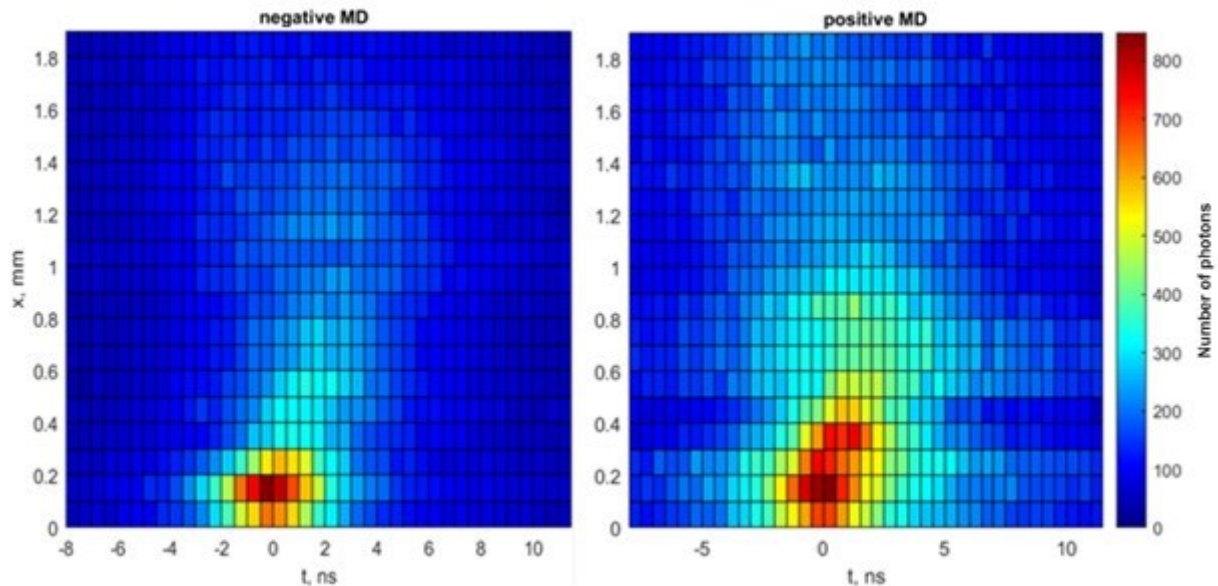


Рис. 2. Пространственно-временная диаграмма светимости разряда на алюминиевом электроде в отрицательной (слева) и положительной (справа) фазах питающего напряжения

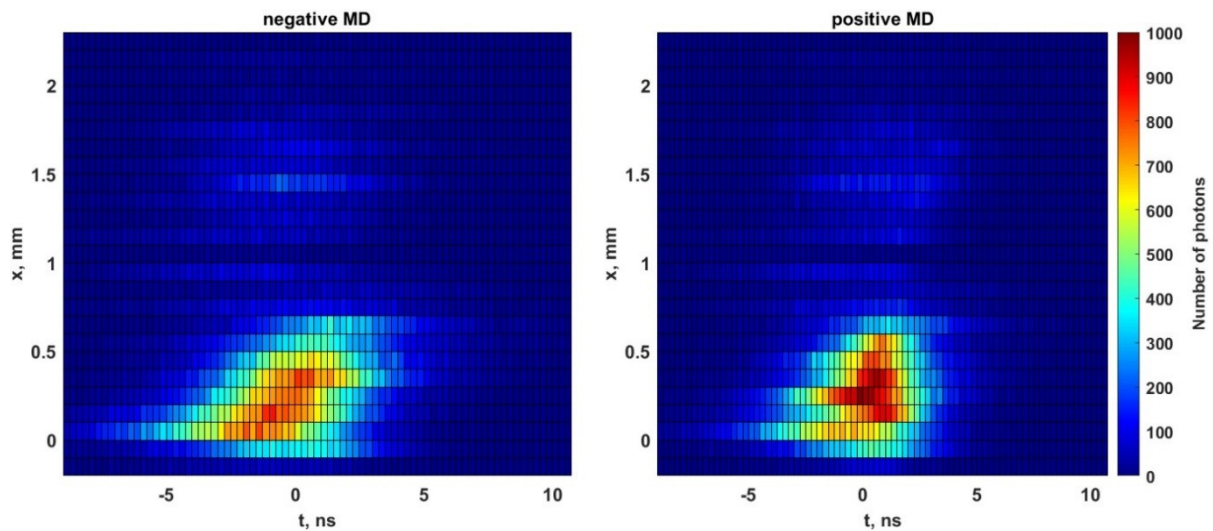


Рис. 3. Пространственно-временная диаграмма светимости разряда на медном электроде в отрицательной (слева) и положительной (справа) фазах питающего напряжения

### Литература

1. *Becker W.* Advanced time-correlated single photon counting techniques. — Heidelberg: Springer, 2005.
2. *Gibalov V.I., Pietsch G.J.* Dynamics of dielectric barrier discharges in different arrangements // *Plasma Sources Sci. Technol.* 2012. V. 21(2): 024010. DOI: 10.1088/0963-0252/21/2/024010.

## Влияние предельного тока разряда на параметры формирующегося искрового канала

Х. Т. Смазнова<sup>1,2</sup>, Е. В. Паркевич<sup>1</sup>, А. И. Хирьянова<sup>1</sup>, С. М. Климович<sup>1,2</sup>, Д. В. Толбухин<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup>Псковский государственный университет

Изучены особенности формирования сильноионизованной приэлектродной плазмы во время развития импульсного наносекундного разряда в воздухе при ограничении предельного тока через разрядный промежуток от нескольких десятков до нескольких сотен ампер. Для регистрации динамики и параметров плазмы разряда использовались техники лазерного зондирования. Установлено, что при ограничении тока через промежуток до нескольких десятков ампер резко падает скорость развития плазмы с катода, а также уменьшается величина ее электронной плотности. При этом ранняя стадия развития плазмы оказывается идентичной при токах амплитудой от  $\sim 10$  до  $\sim 100$  А. Данная стадия связана с формированием микронного катодного пятна сильноионизованной плазмы. Также в экспериментах обнаружено, что при токах в несколько десятков ампер развитие микроструктуры у искрового канала не наблюдается.

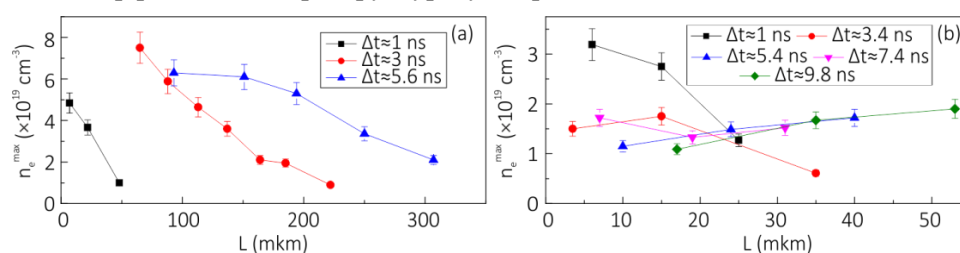


Рис. 1. Распределение электронной плотности плазмы вдоль плазменного канала с катода: *a* — при токе разряда  $I_{\max} \sim 300$  А; *b* — при токе разряда  $I_{\max} \sim 40$  А. Параметр  $L$  (мкм) соответствует расстоянию от поверхности катода до точки определения электронной плотности плазмы в центре симметрии растущего искрового канала

Работа проведена при поддержке гранта Российского научного фонда № 22-29-00799.

### Литература

1. Parkevich E. V., Khirianova A. I. On the Possible Threshold Character of the Spark Microstructure Formation // Bulletin of the Lebedev Physics Institute. 2022. V. 49(9). P. 302–306. DOI: 10.3103/S1068335622090068.

## Коллективные эффекты в активной коллоидной системе сложного состава при воздействии лазерного излучения

Р. В. Сеношенко<sup>1,2</sup>, Е. А. Кононов<sup>1,2</sup>, М. М. Васильев<sup>1,2</sup>, О. Ф. Петров<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Активные коллоидные системы — особая форма «мягкого» конденсированного вещества (soft matter), которая представляет собой дисперсионную среду, содержащую мелкодисперсные активные частицы (капли), способные к самостоятельному передвижению под действием внешних сил [1]. Активные эмульсии представляют собой квазидвумерные стабилизированные структуры из поверхностно-заряженных капель, устойчивых к коалесценции. Механизмы активности и самоорганизации коллективов объектов как в жидких коллоидных системах, так и в природных системах имеют общую природу, их изучение позволит понять некоторые аналогичные механизмы.

Экспериментально исследовано движение в системах, представляющих собой неподвижные структуры из поли- и монодисперсных капель эмульсии сложного состава, при воздействии лазерного излучения. Эмульсии представляли собой дисперсию вазелинового масла с водной суспензией магнетита либо

наночастицами углерода, помещенную в воду со стабилизатором. Для получения эмульсий был использован стенд микрофлюидики.

Неподвижная упорядоченная структура из эмульсионных капель помещалась под стереомикроскоп и подвергалась воздействию лазерного излучения, результат воздействия регистрировался высокоскоростной видеокамерой. Внутрикапельные включения поглощали лазерное излучение, в результате нагрева возникала термофоретическая сила, вызывавшая движение включений, которое, в свою очередь, приводило в движение сами капли эмульсии в результате передачи некомпенсированного импульса. В результате нарушался порядок в структуре, и коллоидная система распадалась.

Было получено перемещение центров капель системы во времени, представлены результаты анализа их траекторий движения. Получены скорости и ускорения капель для каждого момента времени, проведен анализ мгновенных кинетической энергии и энергии движения. Различия в кинетических свойствах капель обуславливается различными поглощающими свойствами примесных наночастиц.

Исследованы зависимости динамической энтропии первого пересечения и средней области локализации от кинетической энергии движения капель эмульсии обеих систем. Капли эмульсии, содержащие углеродные включения, способны совершать движение на более дальние расстояния, чем капли с феррофлюидом, при одинаковой интенсивности лазерного воздействия, что позволяет сделать вывод о различной скорости диссипации энергии для различного состава капель эмульсии. Различие значений области локализации для капель одной системы обусловлено различным содержанием поглощающих частиц в капле эмульсии.

Экспериментально установлено, что движение капель в структурах является активным [2]. Механизм активности в системах реализуется при возникновении движения из-за нагрева капель лазерным излучением, что вызвало распад структуры.

### Литература

1. Xia H., Xu B., Zhang H., Zhang L., Liu X. Biomolecule-assisted hydrothermal synthesis of molybdenum disulfide microspheres with nanorods // *Mater. Lett.* 2012. V. 66. P. 29–32.
2. Bechinger C., Di Leonardo R., Löwen H., Reichhardt C., Volpe G. Active particles in complex and crowded environments // *Rev. Mod. Phys.* 2016. V. 88(4):045006.

УДК 539.89

## Моделирование ударно-волновых процессов в сплаве Mg–Li при высоких давлениях и температурах

*Н. Н. Середкин<sup>1,2,3</sup>, К. В. Хищенко<sup>1,3,4,5</sup>*

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

<sup>3</sup>Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН

<sup>4</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>5</sup>Южно-Уральский государственный университет

Знание термодинамики материалов требуется для решения различных фундаментальных и прикладных задач физики вещества в экстремальных условиях при высоких плотностях энергии. В этой работе представлена модель уравнения состояния для сплава Mg–Li с учетом термических и калорических уравнений состояния и массовых долей компонентов смеси.

Рассматриваются несколько составов системы Mg–Li, а также проводится сравнение с данными ударно-волновых экспериментов. Ударные адиабаты для сплава Mg–Li рассчитаны на основе принципа аддитивности ударных адиабат компонентов [1],

$$V_{12}(P) = \sum_{i=1}^2 \alpha_i V_i(P), \quad (1)$$

а также на основе уравнений состояния для сплава Mg–Li:

$$V_{12}(P, T) = \sum_{i=1}^2 \alpha_i V_i(P, T), \quad E_{12}(P, T) = \sum_{i=1}^2 \alpha_i E_i(P, T), \quad (2)$$

где  $P$  — давление;  $V_{12}$  — удельный объем смеси;  $V_i$  — удельный объем  $i$ -го компонента;  $\alpha_i$  — массовая доля  $i$ -того компонента;  $E_{12}$  — удельная внутренняя энергия смеси;  $E_i$  — удельная внутренняя энергия  $i$ -го компонента.

Результаты расчетов в рамках этих двух подходов сопоставляются друг с другом, а также с имеющимися для Mg–Li ударно-волновыми данными при высоких давлениях и температурах.

### Литература

1. *Alekseev Y.F., Al'tshuler L.V., Krupnikova V.P.* Shock compression of two-component paraffin–tungsten mixtures // J. Appl. Mech. Tech. Phys. 1971. V. 12(4). P. 624–627.

УДК 535.4

## Моделирование дифракции лазерного излучения в приграничном слое «металлический электрод–плазма воздушной среды»

*Д. В. Толбухин<sup>1,3</sup>, А. И. Хирьянова<sup>1</sup>, Е. В. Паркевич<sup>1</sup>, Х. Т. Смазнова<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup>Псковский государственный университет

В работе смоделирована дифракция плоской оптической волны (532 нм) на медном цилиндре. Получены дифракционные графики электрического поля вблизи цилиндра в сечении вместе с графиками изменений интенсивности и фазы волны в регулируемой нами волновой зоне цилиндра (рис. 1). Данные получены путем перевода скалярного волнового уравнения Гельмгольца

$$\frac{\partial^2 T}{(\partial x)^2} + \frac{\partial^2 T}{(\partial y)^2} + \chi^2 T(x; y) = 0 \quad (1)$$

(где  $T$  — функция плоской волны,  $\chi$  — волновое число) в цилиндрическую систему координат, вследствие чего оно переходит в уравнение Бесселя  $x^2 \ddot{y} + x \dot{y} + (x^2 - n^2)y = 0$ , и решения соответствующего уравнения через цилиндрические функции Бесселя и Ханкеля 1-го и 2-го рода.

Результаты работы позволяют предсказать визуализацию реальных плазменных образований в поле когерентного лазерного пучка, регистрируемого в эксперименте оптической системой.

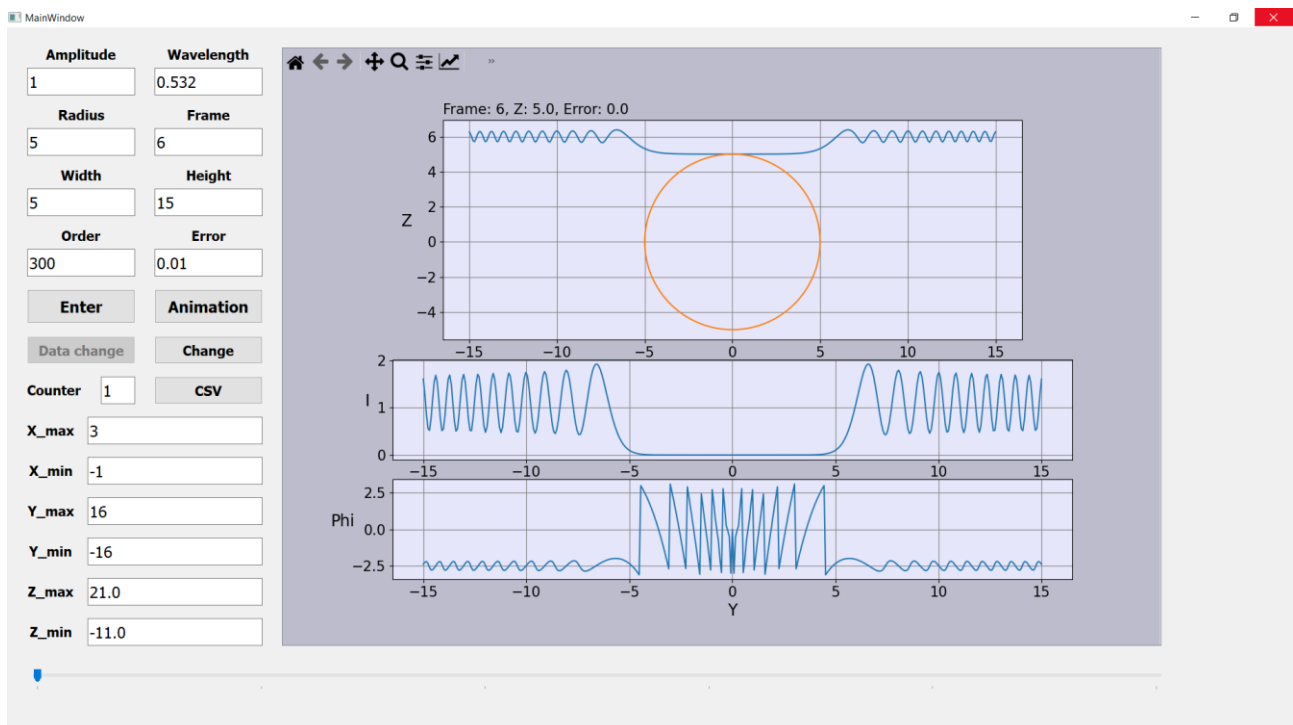


Рис. 1. Двумерные графики амплитуды, интенсивности и фазы дифрагированной волны (532 нм) на краю медного цилиндра радиусом 5 мкм

Работа проведена при поддержке гранта Российского научного фонда № 22-29-00799.

### **Литература**

1. *Parkevich E. V., Khirianova A. I.* Simulation of Laser Diffraction by Micron-Sized Plasma Filaments // Bulletin of the Lebedev Physics Institute. 2022. V. 49(10). P. 10–16. DOI: 10.3103/S1068335622100025.

---

# Секция проблем безопасного развития атомной энергетики

---

Председатель: Л. А. Большов (д. ф.-м. н., академик РАН)

Зам. председателя: А. С. Филиппов (д. т. н., профессор)

Секретарь: И. Г. Обухова

---

Дата: 05.04.2023

Время: 10:00

УДК 539.1:621.39

## **Организация канала связи между оператором и дозиметрическим комплексом, установленном на беспилотном летательном аппарате, при проведении задач радиационного мониторинга**

*И. А. Родионов, А. П. Елохин*

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

При возникновении необходимости в оценке степени радиоактивного загрязнения территории существуют два способа действий: традиционный (с непосредственным участием человека на потенциально радиационно-опасном участке местности) и перспективный (бесконтактный, с дистанционным использованием аппаратуры радиационного контроля, например, беспилотного дозиметрического комплекса (БДК) [1, 2]). Применение БДК для поисково-разведочных работ позволило бы уменьшить риск облучения персонала дозовыми нагрузками на радиационно-опасном участке.

Основными компонентами БДК [2] являются: радиоуправляемый беспилотный носитель и дозиметрический комплекс (ДК), основной задачей которого является сбор, обработка и передача информации о состоянии радиационной обстановки исследуемой окружающей среды, возможность воспроизводства результатов измерений, определение координат и высоты полета.

При разработке ДК возникает практическая задача — осуществление передачи информации в режиме реального времени от оборудования, входящего в состав ДК (ксеноновый гамма-спектрометр, гамма-детектор для измерения мощности дозы, датчик местоположения, высотомер, отладочные платы и т. д.) на ПК оператору, осуществляющему анализ и обработку полученных данных. Возможными каналами передачи данных, являются радиоканал и WI-FI [3, 4].

Важным моментом при организации канала связи является преодоление ограничений, вызванных техническими особенностями аппаратуры. На примере передачи данных по радиоканалу и WI-FI, в работе приведены:

- 1) способы преодоления ограничений аппаратуры связи (дальность связи, ограничения в объеме передаваемой информации и т. д.) при передаче информации от ДК оператору;
- 2) защита от искажений и повреждений информации при передаче по каналу связи.

Целью доклада является показать: преимущества и недостатки каналов связи, организованных с помощью радиоканала и WI-FI, способы их создания и варианты преодоления трудностей, возникающих при эксплуатации оборудования передачи информации в режиме онлайн [4].

Дополнительно рассмотрены сценарии применения БДК для решения задач радиационного мониторинга.

### **Литература**

1. *Елохин А. П.* Методы и средства систем радиационного контроля окружающей среды. — М.: НИЯУ МИФИ, 2014.
2. Патент № RU 2388018C1 Российская Федерация. Способ дистанционного измерения загрязнения радионуклидами подстилающей поверхности в следе радиоактивного выброса радиационно-опасных предприятий и система для его осуществления / А. П. Елохин, Д. Ф. Рау, П. А. Пархома, М. В. Жилина. № 2009117759/28; заявл. 26.06.2009; опубл. 27.04.2010, Бюл. № 12 (IV ч.). С. 947.



3. Родионов И. А., Елохин А. П. Методы оценки радиоактивного загрязнения подстилающей поверхности // Глобальная ядерная безопасность. 2022. № 1(42). С. 6–23.
4. Родионов И. А., Елохин А. П., Рахматулин А. Б., Улин С. Е., Маджидов А. И., Шустов А. Е. Особенности передачи информации по радиоканалу в режиме реального времени при использовании беспилотного дозиметрического комплекса // Глобальная ядерная безопасность. 2023. № 1(46). С. 5–13.

УДК 620.197.7 620.193.81

## Биодеструкция минеральных матриц в условиях хранилищ радиоактивных отходов

*Е. С. Абрамова, А. В. Сафонов, Н. М. Попова*

Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН

В современной концепции долговременного захоронения радиоактивных отходов (РАО) предполагается использовать многокомпонентные системы инженерных барьеров безопасности. Отвержденные РАО помещаются в стальные контейнеры, которые будут окружены глиной, затем цементом и помещены в геологическую формацию на глубину около 500 м. Классическими матрицами для РАО являются цемент и стекло, но они имеют ряд недостатков. Так, остекловывание является высокотемпературным методом [1], срок службы цемента около 70 лет, что не подходит для долговременного захоронения РАО. На данный момент ведется поиск универсальной матрицы для РАО.

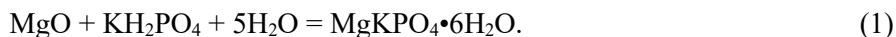
В настоящее время в качестве матрицы для РАО рассматривается магний-калий-фосфатная керамика (МКФ-керамика), которая обладает высокой прочностью, возможностью включения актинидов, устойчива во всем диапазоне рН и к выщелачиванию [2, 3]. Однако присутствие в составе матриц магния, калия и фосфора является предпосылкой для стимулирования микробных процессов при их долговременной локализации в хранилищах. Контакт материалов инженерных барьеров безопасности будет происходить в присутствии аборигенной микрофлоры вод, глин и вмещающей горной породы, а также микрофлоры, привнесенной извне в ходе транспортировки и подготовки материалов многокомпонентных систем [4]. Интенсификация микробных процессов возможна за счет попадания влаги по трещинам горной породы, выхода катионно-обменных и структурных элементов из материалов [5].

Классическим методом предотвращения микробной активности является введение биоцидных добавок, устойчивых в условиях хранилища РАО, имеющих пролонгированное действие и температурную стойкость.

Целью данного исследования является оценка устойчивости материалов матриц для радиоактивных отходов в условиях приповерхностного хранилища РАО с учетом микробных процессов, а также подбор модифицирующей добавки, способствующей предотвращению биообрастания.

В качестве модификаторов были изучены как органические, так и минеральные добавки в концентрации 0,1 масс.%, 0,25 масс.%, 0,5 масс.% (полигексаметиленгуанидин (ПГМГ), аурипигмент, тетрафенилфосфоний, халькопирит, шунгит, полиэтиленимин, тиомочевина).

Для синтеза цементных матриц использовался портландцемент марки М500. Синтез МКФ-матриц был осуществлен согласно уравнению



Кубические матрицы размером 2×2×2 см помещались в модельные условия, имитирующие приповерхностное хранилище РАО. В ходе работы проводили оценку механической прочности на сжатие и выщелачивание. В ходе биологической части оценивали микробную дыхательную активность [6], площадь биообрастания и биовыщелачивание.

Установлено, что на образцах МКФ-матриц микробная дыхательная активность была выше, чем на цементных компаундах. Протекание микробных процессов на поверхности МКФ-компаундов приводит к их частичному растворению и выходу элементов (магния, калия, фосфора), составляющих каркас матрицы. Развитие микробных процессов приводит к ухудшению механической прочности МКФ-керамики и цементов. Для уменьшения биогенного влияния на целостность цементов и МКФ-матриц изучен ряд минеральных и органических биоцидных добавок. Максимально эффективными были полигексаметиленгуанидин (ПГМГ) и аурипигмент в концентрации 0,5 масс.%. Важно отметить, что добавление этих модификаторов улучшает прочностные свойства матриц и способствует иммобилизации технеция в их составе.

## Литература

1. *Maslakov K. I., Stefanovsky S. V., Teterin A. Yu.* [et al.]. X-ray photoelectron study of lanthanide borosilicate glass // *Glass Phys. Chem.* 2009. V. 35. P. 21–27.
2. *Vinokurov S. E., Kulyako Y. M., Slyunchev O. M.* [et al.]. Magnesium potassium phosphate matrices for immobilization of high-level liquid wastes // *Radiochemistry.* 2009. V. 51. P. 65–72.
3. *Vinokurov S. E., Kulikova S. A., Krupskaya V. F.* Magnesium potassium phosphate compound for radioactive waste immobilization: Phase composition, structure, and physicochemical and hydrolytic durability // *Radiochemistry.* 2018. V. 60(1). 2018. P. 70–78.
4. *Safonov A. V., Boldyrev K. A.* URL in the Nizhnekanskiy Massif: Studying biogenic processes under HLW disposal project // *Radioactive Waste.* 2019. V. 2(7). P. 92–100.
5. *Abramova E., Popova N., Artemiev G., Zharkova V., Zakharova E., Safonov A.* Characteristics and rates of microbial processes in clays of different mineral and elemental composition in relation to safety prediction for ESB clay materials // *Appl. Sci.* 2022. V. 12(4): 1843.
6. *Cory A. H., Owen T. C., Barltrop J. A., Cory J. G.* Use of an aqueous soluble tetrazolium/formazan assay for cell growth assays in culture // *Cancer Commun.* 1991. V. 3. P. 207–212

УДК 621.039

### Анализ экспериментальных данных для валидации расчетной модели скруббирования продуктов деления при барботаже парогазовой смеси в воде

*Н. Д. Гембицкий<sup>1,2</sup>, К. С. Долганов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Аварии на ядерных энергетических установках, связанные с их полным обесточиванием, могут приводить к выбросам радиоактивности в окружающую среду. В частности, моделирование тяжелой аварии на АЭС с реактором ВВЭР-1000 с помощью интегрального тяжелоаварийного кода СОКРАТ [1] демонстрирует, что при полном обесточивании энергоблока и отказе на закрытие быстродействующей редукционной установки со сбросом пара в атмосферу происходит разрушение активной зоны и байпасирование контейнента продуктами деления, сопровождающееся большим радиоактивным выбросом.

С целью снижения радиоактивного выброса в авариях с байпасированием контейнента было предложено использовать явление скруббирования, отражающее свойство аэрозолей осаждаться в водном объеме при барботаже несущей парогазовой смеси. В качестве технической реализации скруббирования аэрозолей паросбросные устройства дополняются баком-барботером. Расчетные оценки в обоснование этого технического решения выполнялись при помощи кода СОКРАТ с использованием модели скруббирования, разработанной в 2016 году [2]. По результатам валидации модели скруббирования была отмечена недооценка осаждаемой массы в расчете и необходимость дополнительной валидации на данных экспериментов с более широким диапазоном параметров сред.

Целью данной работы является анализ различных серий экспериментов по осаждению продуктов деления при барботаже в водной среде на предмет соответствия их параметров условиям, ожидаемым в тяжелой аварии на АЭС с ВВЭР с байпасированием контейнента, для дальнейшего использования при валидации расчетной модели скруббирования в коде СОКРАТ.

Согласно результатам моделирования тяжелой аварии, истечение парогазовой смеси в водный объем бака-барботера происходит в струйном режиме, характеризуется высоким содержанием пара и разностью температур между парогазовой средой и водой в барботере.

Анализ результатов различных серий экспериментов, описанных в открытой литературе [3], позволил выделить прототипные данные, подходящие для валидации модели скруббирования на АЭС с ВВЭР: серии LACE-España, ACE, RCA, POSEIDON-II, SGTR, ARTIST и ARTIST-II.

На основе анализа определены диапазоны ключевых теплогидравлических параметров, достаточность данных о средствах и погрешностях измерений, доступность и достаточность описания экспериментов. По итогам анализа составлена матрица валидации модели скруббирования в СОКРАТ.

## Литература

1. *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 // *Nucl. Eng. Des.* 2019. V. 341. P. 326–345.

2. *Kиселев А. Е.* [и др.]. Создание вычислительной модели прохождения продуктов деления через водную среду в энергоблоке АЭС и апробация ее на примере анализа радиационных последствий аварии на АЭС Фукусима-1: отчет о НИР. — М.: ИБРАЭ РАН, 2017.
3. *Herranz L. E., Sánchez F.* New pool scrubbing correlations based on reliable data // Ann. Nucl. Energy. 2023. V. 183(2): 109639.

УДК 621.039.68

## **Анализ аварии с доступом воздуха в вакуумную камеру ИТЭР с использованием программы для ЭВМ СОКРАТ-В1/В2**

*И. С. Ахмедов, Н. И. Рыжов*

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Для анализа феноменологии аварии с потерей вакуума (LOVA) на ИТЭР с помощью ПрЭВМ СОКРАТ используются исходные данные и результаты моделирования по ПрЭВМ MELCOR, приведенные в статье [1]. Интегральная программа MELCOR имеет большой опыт использования для моделирования тяжелых аварий на АЭС, но после специальной адаптации используется также и для расчета источников водорода и оценки характеристик радиоактивных выбросов в окружающую среду в авариях на термоядерных установках (ТЯУ) [2, 3]. ПрЭВМ СОКРАТ является основным инструментом интегрального анализа тяжелых аварий на АЭС с ВВЭР, сопровождающихся повреждением активной зоны, выходом водорода и радиоактивными выбросами в окружающую среду [4]. Контуры охлаждения элементов вакуумной камеры (ВК) ИТЭР и активной зоны ВВЭР подобны по типу теплоносителя (недогретая до насыщения вода под давлением), по топологии и по используемому оборудованию (насосы, трубные теплообменники, компенсаторы давления). Это позволяет проводить оценки возможностей СОКРАТа моделировать поведение ТЯУ в феноменологических окнах, определяющихся теплогидравлическими процессами.

Анализ сценария LOVA [1] проведен в фиксированных условиях, что способствует лучшему пониманию феноменологии и идентификации причин возможных расхождений в расчетах по двум ПрЭВМ, хотя и обуславливает модельный характер анализируемой задачи.

Целями данной работы являются:

исследование феноменологии гипотетической аварии LOVA на ИТЭР;

кросс-верификация моделей критического и докритического истечения воздуха в ВК, теплообмена воздуха со стенками ВК, первой стенки и дивертора в режиме естественной конвекции в ВК в составе СОКРАТа на результатах расчета задачи [1] по MELCOR.

Проведенная квалификация исходных данных позволила получить дополнительную информацию о допущениях, использованных в расчетах по MELCOR, а именно, установить, что в расчетах использовался коэффициент расхода, соответствующий истечению через отверстие с острыми кромками ( $\mu=0,8$ ). Задание коэффициента расхода  $\mu=0,8$  позволило корректно воспроизвести скорость газа в проходке (рис. 1а).

На начальном этапе протекания аварии происходит критическое истечение воздуха из ПБ в ВК. Поступающий воздух в ВК нагревается от стенок, моделирующих элементы оборудования, в режиме естественной конвекции. После выравнивания давления в результате продолжающегося нагрева среды в ВК происходит обращение потока, разогретый газ начинает поступать из ВК в ПБ. Спустя час после начала аварийного процесса включается система детритизации, ее работа приводит к тому, что направление течения снова меняется.

Численный анализ модельной аварии LOVA при помощи СОКРАТа показал, что основные процессы и явления, определяющие поведение теплогидравлических параметров, воспроизводятся верно, тем самым подтвердив возможность применения моделей СОКРАТа для указанных выше процессов и явлений в условиях, характерных для аварии LOVA на ИТЭР. Различия в основном связаны с недостаточно подробным описанием расчетов по MELCOR в статье [1]. В частности, отдельного анализа требуют различия в изменении температуры газа в помещении байпаса (ПБ) (рис. 1б). В интервале времени, на котором происходит обратное течение горячего газа из ВК в ПБ (красная область на рисунке), в расчете по MELCOR температура газа уменьшается. Согласно [1] в ПБ отсутствуют элементы, которые могли бы способствовать остыванию газа, поступающего из ВК.

Анализ результатов показал, что небольшая недооценка глубины вакуума, обусловленная ограничением теплогидравлической модели (в ВК было задано минимальное давление 611 Па), не вносит существенной погрешности в результаты расчетов. Начальное давление составляет ~1% от давления перехода к докритическому режиму истечения, что сдвигает время перехода на ~4 с. В масштабе времени, при котором происходит переход к течению из ВК в ПБ, который составляет ~2000 с после исходного события, эта погрешность может рассматриваться как несущественная.

Результаты работы могут быть использованы для определения первоочередных задач по адаптации существующих моделей СОКРАТА к условиям аварий на ТЯУ.

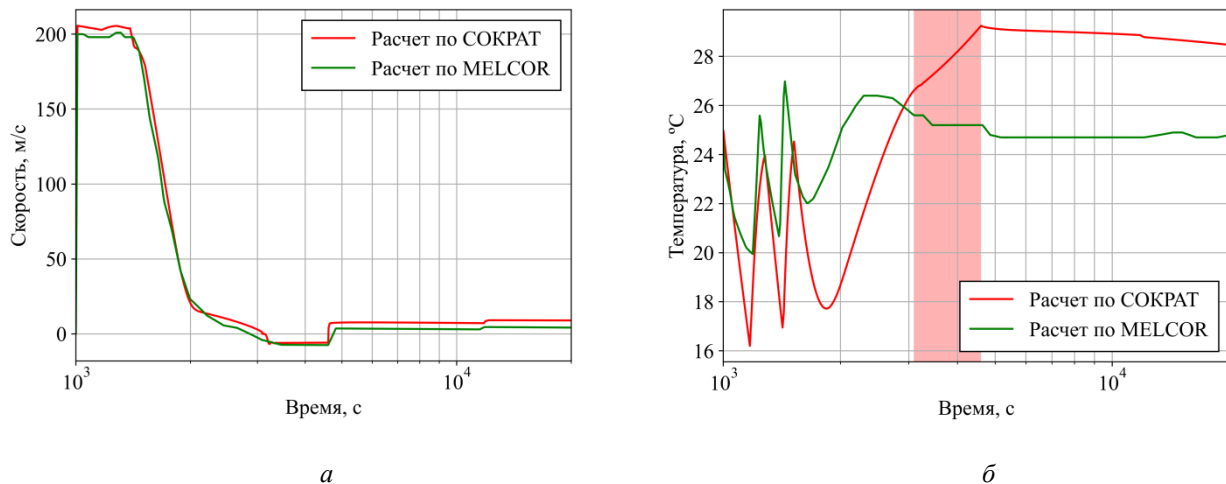


Рис. 1. Результаты расчета модельной задачи LOVA по ПрЭВМ СОКРАТ и MELCOR: а — температура газа в ПБ; б — скорость газа в проходке

### Литература

1. *Honda T.* [et.al.]. Analyses of loss of vacuum accident (LOVA) in ITER // Fusion Eng. Des. 2000. V. 47. P. 361–375.
2. *Merrill B. J., Humrickhouse P. W., Moore R. L.* A comparison of modifications to MELCOR Versions 1.8.2 and 1.8.6 for ITER safety Analyses: INL/EXT-09-16715. — Idaho Falls: INL, 2010.
3. *Mascari F.* [et al.]. Physical models necessary to be implemented in MELCOR\_2.2 for fusion reactor safety analyses and the current model already implemented in MELCOR fusion // The 10th Meeting of the “European MELCOR User Group”, Zagreb, Croatia, 25–27 April 2018.
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 // Nucl. Eng. Des. 2019. V. 341. P. 326–345.

УДК 621.039.58

### Анализ влияния учета подъема факела из вентиляционной трубы на прогнозируемые дозы населения от штатных выбросов АЭС

*П. А. Коняев, А. А. Киселев*

ИБРАЭ

Конвективный подъем облака выброса при штатной работе АЭС является одним из факторов, определяющих распространение примеси в атмосфере [1, 2] и, как следствие, формирование доз облучения населения. Учет подъема в моделях атмосферного переноса может быть выполнен с использованием полуэмпирических зависимостей, опирающихся на данные о термодинамических характеристиках выброса и данные о параметрах атмосферы. Большинство существующих кодов для обоснования безопасности используют высоту вентиляционной трубы в качестве высоты выброса, в аттестованной версии кода РОМ [3] эффективная высота может быть установлена для средних метеорологических условий и принимается одинаковой вне зависимости от наблюдаемых метеорологических параметров. На сегодняшний день в рамках развития кода РОМ была разработана технология динамического учета эффективной высоты в зависимости от конкретных метеорологических условий, анализируемых в коде при моделировании доз облучения населения при штатных выбросах (код РОМ обрабатывает многолетнюю историю метеонаблюдений для

получения среднегодовых характеристик). В рамках данной работы на примере одной из площадок размещения АЭС рассматривается влияние детализированного учета всплывающего облака на результат расчета.

Для решения данной задачи была разработана связка моделей WRF-ARW (численная модель прогноза погоды), модель расчета эффективной высоты на основе эмпирических формул Неттервилла [4] и модель вариантных расчетов в коде РОМ. Особенностью связки является использование модельных значений метеорологических параметров (температура, скорость ветра, коэффициент шероховатости, обратная длина Монино–Обухова, скорость трения и параметр Кориолиса), интерполированных в место положения источника выброса и дополненных недостающими значениями по моделям оценки категорий стабильности атмосферы [5]. В результате формируются значения эффективной высоты подъема облака, уникальные для каждого расчетного времени и соответствующие расчетным и/или наблюдаемым метеорологическим параметрам (пример такого расчета представлен на рис. 1). Как видно из графика, средняя высота выброса много выше начальной высоты и равна 188 м против 120 м высоты трубы, максимальная и минимальная эффективная высота достигала 436 м и 82 м соответственно. С точки зрения последствий этот разброс представляется значимым, однако за счет непрерывности выбросов влияние этого процесса может быть нивелировано при осреднении по многолетним данным. Рассмотрим влияние более подробно.

Для этого были выполнены расчеты атмосферного переноса и доз облучения населения по коду РОМ, но для разных высот выброса. Рассматривались следующие модельные параметры. Радиус зоны моделирования составляет 40 км, а размер расчетной ячейки 400 м × 400 м, высота вентиляционной трубы равна 120 м. Размер ячейки метеорологических полей составлял 2 км с дискретизацией по времени 1 ч.

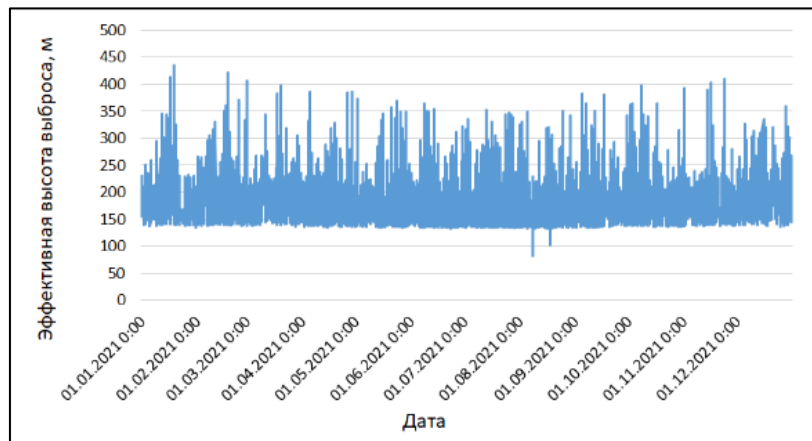


Рис. 1. Расчетное распределение эффективной высоты выброса в течение рассматриваемого года

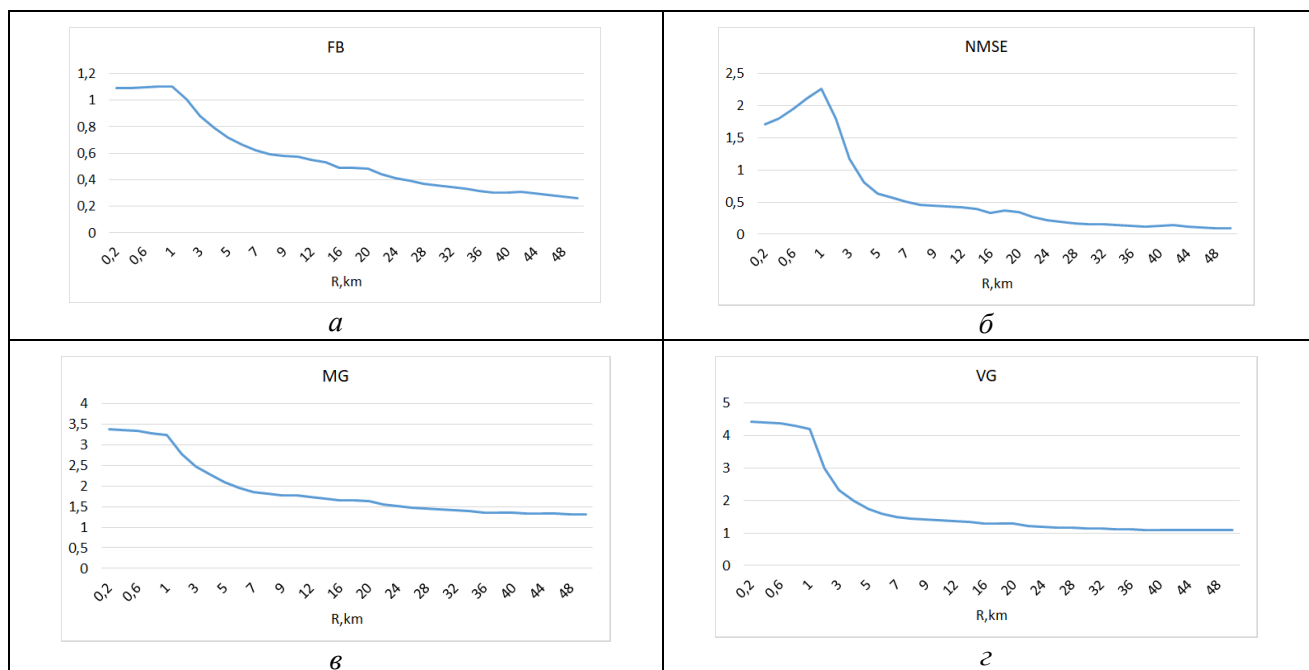


Рис. 2. Метрики FB (а), NMSE (б), MG (в) и VG (г) по дугам в зависимости от расстояния от источника

Для целей численного сравнения пространственного распределения результаты кодов POM и POM2 были рассчитаны метрики (рис. 2) FB, NMSE, MG и VG по дугам в зависимости от расстояния от источника, максимальные значения этих показателей равны  $FB=1,1$  и  $NMSE=2,26$  соответственно. Можно видеть (рис. 3), что отличия максимальных значений на расстояние 3 км в точках максимума могут достигать до 5 раз. Полученные результаты показывают, что учет эффективной высоты выброса значительно влияет только на результаты в ближней зоне, что согласуется с данными работы [2], а отличия могут достигать 4 и более раз. На больших расстояниях за счет диффузии облака, его перемешивания и разбавления данный эффект становится менее значимым и является пренебрежимо малым. Однако при оценках доз от штатных выбросов особое внимание уделяется дозам на границе СЗЗ, которая расположена как раз на расстояниях 1–3 км от источника.

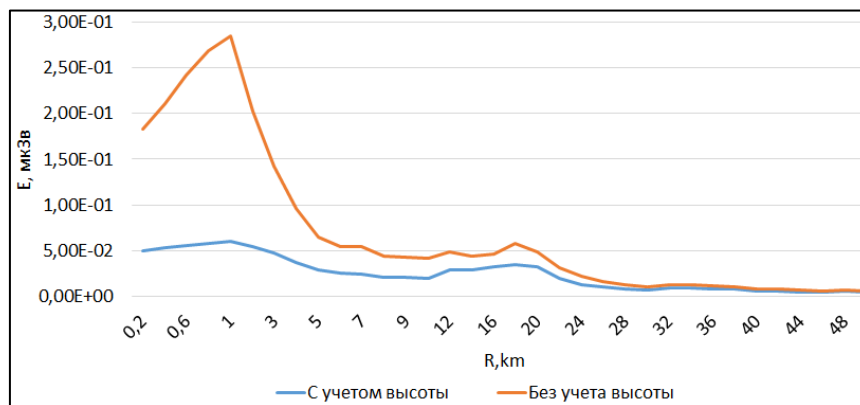


Рис. 3. Оси следа распределения эффективной дозы с учетом набора эффективной высоты выброса (синяя линия) и без учета (рыжая линия)

### Литература

1. Иванов Е. А., Клепикова Н. В., Троянова Н. И., Фреймундт Г. Н. Методы расчета подъема факела из вентиляционной трубы // АНРИ. 2014. № 4(79). С. 18–32.
2. Берлянд М. Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. — Л.: Гидрометеоздат, 1975.
3. Отчет о верификации и обосновании программного средства «Программа для расчета радиационной обстановки в мезомасштабе. Версия 1.1 (POM)». — М.: ИБРАЭ РАН, 2017.
4. Netterville D. D. Y. Plume rise, entrainment and dispersion in turbulent winds // Atmos. Environ. 1990. V. 24A(5). P. 1061–1081.
5. Mohan M., Siddiqui T. A. Analysis of various schemes for the estimation of atmospheric stability classification // Atmos. Environ. 1998. V. 32(21). P. 3775–3781.

УДК 502.47.502.55; 621.039.73

### Геохимическое моделирование иммобилизации урана в подземных водоносных горизонтах с учетом биогеохимического фактора

Н. М. Попова<sup>1</sup>, А. В. Сафонов<sup>1</sup>, К. А. Болдырев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН

<sup>2</sup>Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Комплексное загрязнение подземных вод ураном и другими радионуклидами, а также соединениями азота и серы происходит в результате нарушения целостности инженерных барьеров безопасности хранилищ РАО при длительной эксплуатации. При моделировании распространения радионуклидов в подземных водах необходим комплексный учет влияния микрокомпонентов, физико-химических и гидродинамических факторов, минерального состава вмещающих грунтов и биогеохимических процессов [1]. Последние могут оказывать значительное влияние на изменение геохимических параметров водоносного горизонта, например способствовать формированию новых минеральных фаз железа, серы, фосфора, карбонатов и радионуклидов. Особенно активно эти процессы могут протекать при активации микробного сообщества растворимыми органическими соединениями при *in situ* биоремедиации, которая

является одним из перспективных методов очистки водоносных горизонтов, обеспечивая перевод в нерастворимое состояние соединений серы, азота и радионуклидов.

В данном исследовании на основании серии лабораторных экспериментов и термодинамического моделирования в программном пакете PHREEQC разработана модель миграции урана в подземных водах вблизи шламохранилищ нескольких предприятий, позволяющая учитывать комплексные механизмы его иммобилизации. Установлено, что снижение концентрации нитратов и формирование восстановительных условий, а также биообрастание вмещающих грунтов может являться важным фактором иммобилизации урана в первые месяцы после биоремедиации, однако наиболее важным фактором является формирование аутигенных минеральных осадков железа и серы, способствующих долговременной иммобилизации урана при последующем попадании окислителя (нитратов, кислорода) в систему.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-24-00701.

### Литература

1. *Safonov A. V., Boguslavsky A. E., Gaskova O. L., Boldyrev K. A., Shvartseva O. S., Khvashchevskaya A. A., Popova N. M.* Biogeochemical modelling of uranium immobilization and aquifer remediation strategies near NCCP sludge storage facilities // Appl. Sci. 2021. V. 11(6): 2875. DOI: 10.3390/app11062875.

УДК 621.039.58

## Сравнительный анализ оценок осаждения техногенных аэрозолей от аварийных выбросов радиоактивных веществ за счет подоблачного вымывания в случае интегральных и дисперсных моделей

*А. С. Осадчий, А. А. Киселев*

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Влажное осаждение — процесс, при котором вещество, находящееся в атмосфере в виде частиц аэрозоли или газа, осаждается на поверхность земли за счет взаимодействия с гидрометеорами (дождевые капли, снег, град и т. д.) [1]. Влажное осаждение принято разделять на внутриоблачное вымывание и подоблачное вымывание, тем не менее при наличии осадков подоблачное вымывание является доминирующим механизмом переноса радиоактивных частиц на поверхность и впоследствии формирования доз (например, внешнее облучение от поверхностных выпадений и внутреннее от непреднамеренного заглатывания). В работе [2] был получен мультимодельный ансамбль, сформированный из моделей подоблачного вымывания, учитывающих гранулометрический состав аэрозоля и покрывающий разброс экспериментальных данных. Также авторами работы было проведено сравнение моделей ансамбля, использующихся в кодах переноса, с другими моделями вымывания, в том числе интегральными, представленными в виде зависимости от интенсивности осадков ( $\Lambda = a \times I^b$ ). Однако данный анализ проведен в ограниченном режиме, при котором не представлены условия, в которых поведение интегральных моделей совпадает с моделями, учитывающими размерное распределение аэрозоля.

Таким образом, актуальной задачей становится исследование условий применимости интегральных моделей подоблачного вымывания при сопоставлении с моделями, учитывающими размерное распределение аэрозоля. В связи с этим в данной работе был проведен сравнительный анализ моделей ансамбля из работы [2] с расширенным набором интегральных моделей. Для этого рассматривалось логнормальное распределение аэрозоля по диаметрам с характеристиками Чернобыльских аэрозолей, наблюдаемых в первые дни после аварии [3], и были получены расчетные значения долей массовой концентрации аэрозоля, осажденной за счет подоблачного вымывания, для различных интенсивностей осадков.

В табл. 1 приведено описание моделей, исследуемых в работе: модели ансамбля, учитывающие микрофизические процессы взаимодействия аэрозольных частиц с каплями, среди которых броуновская диффузия, зацепление, инерционный захват, термо- и диффузиофорез, а также размерное распределение осадков; интегральные модели NAME, Baklanov, Apsimon, Jylha, Flexpart из соответствующих работ.

На рис. 1 представлены графики изменения массовой концентрации аэрозоля со временем для различных интенсивностей осадков, мм/ч. Рассматривались три распределения аэрозоля с различными ММАД (массовый медианный аэродинамический диаметр) — 1,0 мкм, 3,0 мкм и 8,0 мкм [3]. На графиках из левого столбца для ММАД 1,0 мкм имеет место завышение вымывания интегральными моделями по сравнению с моделями ансамбля до 100%. Для распределения с ММАД 8,0 мкм, наоборот, модели

ансамбля превалируют над интегральными моделями, значения различаются до 100% и до 500% для интенсивностей осадков 2,5 и 10,0 мм/ч соответственно. При значении ММАД 3,0 мкм, результаты расчетов ансамбля моделей близки с интегральными, различия в вымываниях составляют не более 20%. Таким образом, рассмотренные интегральные модели совпадают с моделями, учитывающими гранулометрический состав аэрозоля, при ММАД логнормального распределения аэрозоля ~ 3,0 мкм и интенсивностях осадков от 0.01 до 10,0 мм/ч.

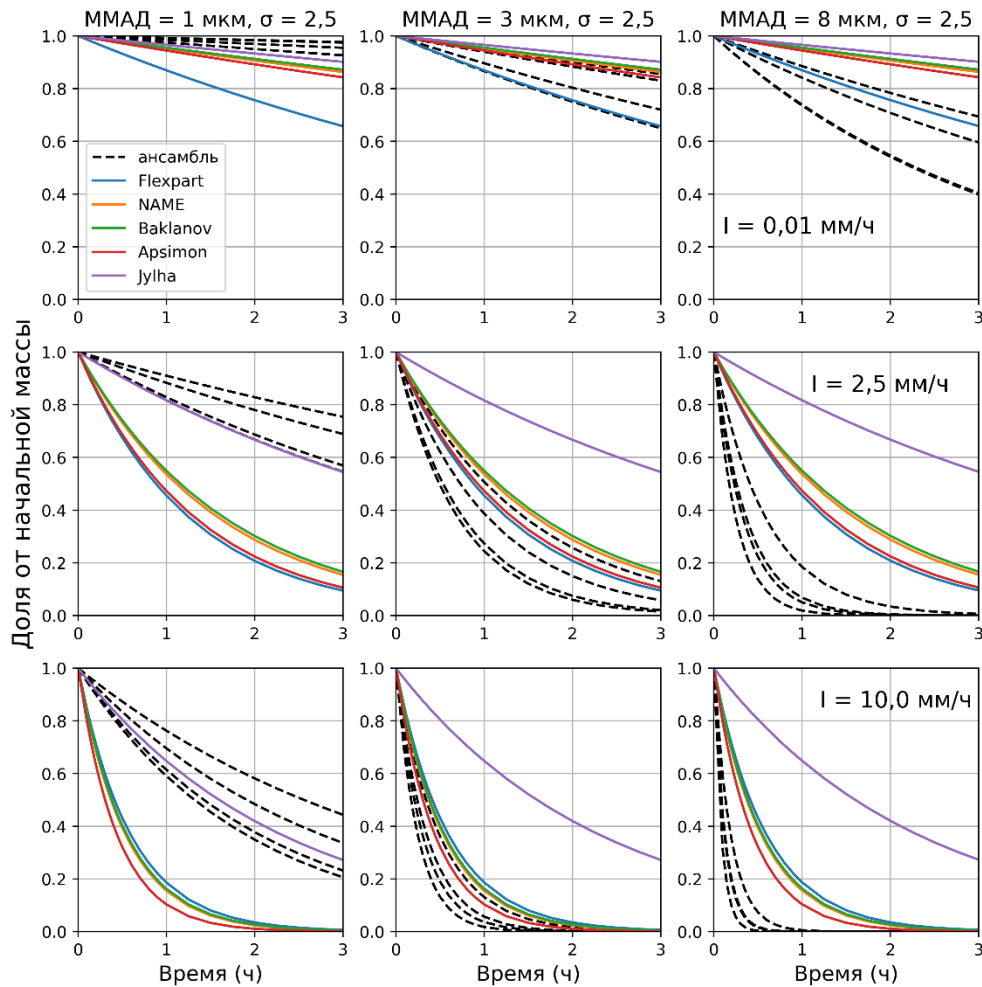


Рис. 1. Изменение массовой концентрации аэрозоля со временем для трех распределений

Т а б л и ц а 1. Описание моделей подоблачного вымывания, использованных для сравнительного анализа

Мультимодельный ансамбль	$\Lambda(d) = \int_0^\infty E(D, d) V(D) \frac{\pi D^2}{4} N(D) dD$			
Остальные модели	NAME $\Lambda = 8,4 \cdot 10^{-5} I^{0,79}$	Baklanov $\Lambda = 8 \cdot 10^{-5} I^{0,8}$	Apsimon $\Lambda = 1 \cdot 10^{-4} I^{0,8}$	Jylha $\Lambda = 3,4 \cdot 10^{-5} I^{0,55}$
	FLEXPART $\Lambda = 0,33 \cdot 10^{-4} I^{0,42} + 1,0 \cdot 10^{-4} I^{0,58}$			

Здесь  $d$  — диаметр аэрозольной частицы, м;  $D$  — диаметр капли, м;  $E(D)$  — эффективность захвата каплей  $V(D)$  — предельная скорость капли, м/с;  $N(D)$  — функция распределения дождевых капель по размерам, м<sup>-4</sup>;  $I$  — интенсивность осадков, мм/ч

### Литература

1. Seinfeld J. H., Pandis S. N. Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change. — Hoboken: Wiley, 2006. P. 900–929.
2. Kiselev A., Osadchiy A., Shvedov A., Semenov V. Ensemble of below-cloud scavenging models for assessing the uncertainty characteristics in wet raindrop deposition modeling // Atmosphere. 2023. V. 14: 398. DOI: 10.3390/atmos14020398.
3. Ogorodnikov B. I., Budyka A. K., Pavlyuchenko N. I. Observation of radioactive aerosol emissions from the sarcophagus at the Chernobyl nuclear power plant // At. Energy. 2004. V. 96. P. 202–213.



## Повышение точности характеристики контейнеров РАО больших объемов с помощью систем получения гамма-изображений

*О. П. Иванов, В. Н. Потапов, И. А. Степалин*

НИЦ «Курчатовский институт»

В настоящее время характеристика радиоактивных отходов (РАО), определение активности различных нуклидов в упаковках больших объемов (контейнерах) делается на основе спектрометрических измерений коллимированными системами и последующим расчетом активностей в предположении однородного распределения активности в контейнере [1]. Однако неоднородность распределения активности может приводить к значительным ошибкам определения искомых величин.

Сейчас имеются различные портативные системы получения гамма-изображений источников излучения со спектральным разрешением (портативные гамма-камеры и гамма-сканеры [2]). Такие системы могут быть использованы для учета неоднородностей в распределении активностей РАО и получения более точных сведений о содержимом контейнеров.

С помощью гамма-изображений контейнера в двух (и более) ракурсах, полученных с разных сторон, можно получить достаточно точную информацию о распределении нуклидов внутри контейнера (метод малоракурсной томографии [3]), а значит, обеспечить более точную характеристику РАО.

Для осуществления такого подхода можно использовать довольно чувствительные портативные гамма-камеры, например такие, как камеры GUALI (Испания), Polaris (США) [4].

Была проведена расчетно-экспериментальная проверка возможности применения предлагаемого способа оценки неоднородности РАО с помощью получения гамма-изображений портативным гамма-сканером, использующим разные спектральные области для идентификации различных радионуклидов [5]. Такое гамма-изображение, как и в случае гамма-камер, представляет интегральное распределение активности вдоль лучей, исходящих из точки расположения системы (верная томография).

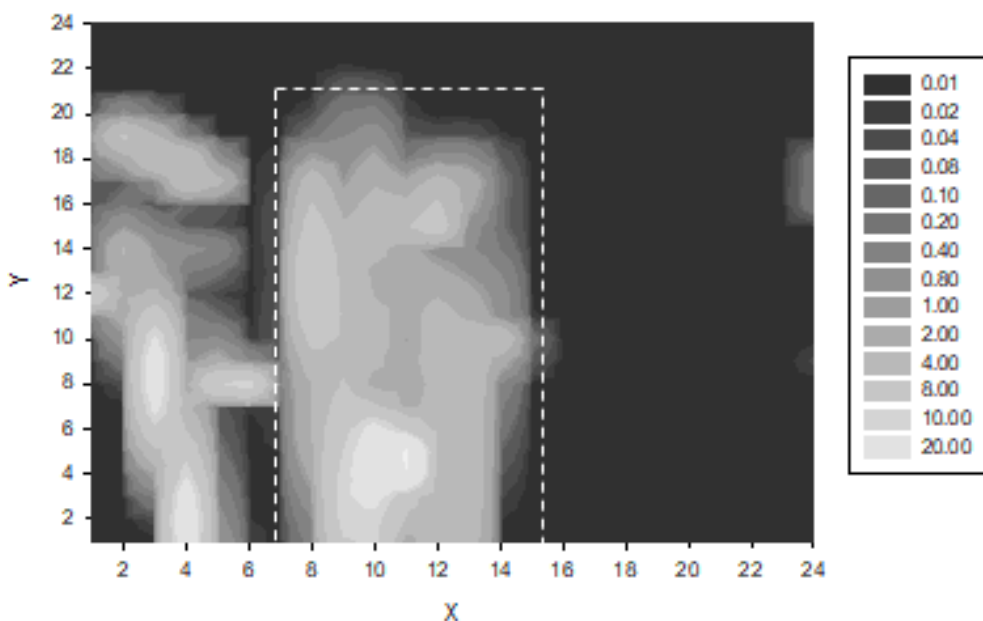


Рис. 1. Рассчитанное распределение активности Cs-137 в бетонном контейнере НЗК, построенное по методу проекций максимальной интенсивности для воксельных данных. Прямоугольная рамка изображают профиль 200-литровой металлической бочки с радиоактивными отходами. Цветовая легенда характеризует активность (в усл. ед.) в логарифмическом масштабе

Полученные результаты обработки данных сканирования указывают на возможность использования предложенного метода. При обработке результатов измерений в контейнере для получения распределений активности в воксельном виде, была выявлена область/емкость, содержащая повышенную активность внутри засыпки с менее активными нуклидами, что хорошо видно на представленном рис. 1.

## Литература

1. АМПЛИТУДА: технологии радиационной безопасности [сайт]. — URL: <https://amplituda.ru/catalog/radiatsionnyu-kontrol/oborudovanie-radiatsionnogo-kontrolya-2/pasportizatory-rao/> (дата обращения 13.03.2023).
2. Иванов О. П., Ковалев В. М., Степанов А. В., Степанов В. Е., Степанов Е. А. Опыт применения портативных гамма-камер (гамма-визоров) в работах по выводу из эксплуатации и реабилитации ОИАЭ// АНРИ. 2022. № 1(108). С. 19–35.
3. Филонин О. В. Малоракурсная компьютерная томография в физическом эксперименте// Вестник СГАУ. 2003. № 1. С. 136–145.
4. Caballero L., Albiol Colomer F., Corbi Bellot A. [et al.]. Gamma-ray imaging system for real-time measurements// J. Instrum. 2018. V. 13: P03016.
5. Иванов О. П., Игнатов С. М., Потапов В. Н., Самойлова М. А., Семин И. А. Гамма-сканер с антиколлиматором для визуализации источников  $\gamma$ -излучения// ПТЭ. 2021. № 2. С. 115–120.

УДК 621.039

### Распределение температуры внутри жидких включений во внешнем поле температурного градиента

О. О. Корчагина

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Жидкие включения в кристаллах соляных отложений могут двигаться вдоль градиента температуры к источнику тепла [1, 3]. Этот процесс называется термомиграцией, и знание его закономерностей обеспечивает безопасную изоляцию радиоактивных отходов. Для моделирования этого процесса необходимо знать распределение температур как в твердом теле, так и в жидких включениях, в зависимости от их формы и размеров.

В работе решается задача теплопроводности с учетом различия теплофизических свойств сред и выводится аналитическая формула для градиента температуры внутри включений.

Рассматриваются включения эллипсоидальной формы разных размеров. Считается, что короткая ось во включениях направлена вдоль  $OX$  и называется « $a$ », длинные вдоль  $OY$  и  $OZ$  называются « $b$ » и « $c$ » соответственно ( $a < b = c$ ).

В работах [1, 3] рассматривались монокристаллы  $KCl$ , в которых искусственно создавались включения насыщенного раствора  $KCl$  в воде. В работе [1] предполагается, что  $\nabla T_i \sim b/a$ . В решении задачи о кинетической модели миграции ансамбля включения [2] для нахождения скорости миграции использовалась следующая формула для градиента температуры:

$$\nabla T_i \sim b/a \nabla T_e. \quad (1)$$

Используя аналогию в распределении электрических и тепловых полей, в [3] была получена следующая приближенная связь между градиентами температуры в объеме включения  $\nabla T_i$  и градиентом температуры в матрице  $\nabla T_e$ :

$$\nabla T_i \approx \left(1 + \varphi \frac{b}{a}\right) \nabla T_e, \quad (2)$$

где  $\varphi$  — константа, зависящая от сорта кристалла и включения для системы  $KCl-H_2O$ ,  $\varphi \approx 1/2$ .

В этих работах не учитывалась разность коэффициентов теплопроводности сред.

Далее было отмечено, что стационарное уравнение теплопроводности идентично уравнению Максвелла для постоянного электрического поля при отсутствии свободных зарядов, поэтому можно воспользоваться решением уравнения Пуассона для потенциала электрического поля [4], чтобы получить распределение теплового поля внутри включения.

Рассматривается диэлектрический (с проницаемостью  $\varepsilon_i$ ) эллипсоид с осями  $a < b = c$ . Эллипсоид помещен в постоянное однородное внешнее электрическое поле  $E$ , направленное по оси  $OX$ . Внутри эллипсоида потенциал должен быть конечным, поэтому  $\varphi = b\varphi_0$ .

Нас интересует поле только внутри эллипсоида. Оно обладает тем свойством, что наведенное электрическое поле в нем всегда будет однородным, и связано с внешним полем следующим соотношением:

$$E_{ix} = \frac{E_{0x}}{1 + (\varepsilon_i - 1)n_x},$$

где  $n_x$  — коэффициент деполяризации

$$n_x = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{ds}{(s+a^2)R_s} = \frac{1 + \operatorname{exc}^2}{\operatorname{exc}^3} (\operatorname{exc} - \operatorname{arctg} \operatorname{exc}); \quad \operatorname{exc} = \sqrt{\frac{b^2}{a^2} - 1} \quad (a < b = c); \quad \operatorname{exc} = \sqrt{\frac{b^2}{a^2} - 1} \xrightarrow{b \gg a} \frac{b}{a};$$

$$n_x = \frac{1 + b^2/a^2}{b^3/a^3} \left( \frac{b}{a} - \frac{\pi}{2} \right) \sim 1 - \frac{a\pi}{2b}.$$

Далее пользуемся аналогией и меняем обозначения:

$$\nabla T_i = -E_{ix}, \quad \nabla T_0 = -E_{0x} \Rightarrow \nabla T_i = \frac{\nabla T_0}{1 + (\varepsilon_i - 1)n_x} = \frac{\nabla T_0}{1 + (\kappa_i/\kappa_e - 1)n_x} = \frac{\kappa_e \nabla T_0}{\kappa_e + k_i n_x - k_e n_x} = \frac{\kappa_e \nabla T_0}{\kappa_e (1 - n_x) + k_i n_x},$$

$$\kappa_i = \varepsilon_i \kappa_e$$

где

$$n_x \sim 1 - \frac{a\pi}{2b}, \quad \kappa_e \approx 7, \quad \kappa_i \approx 0,6, \quad b/a \approx 3 \div 10 \rightarrow \nabla T_i = \nabla T_0 \frac{\kappa_e}{\kappa_e \frac{\pi a}{2b} + \kappa_i}. \quad (3)$$

Формула (3) учитывает теплофизические свойства вещества и соотношение сторон включений.

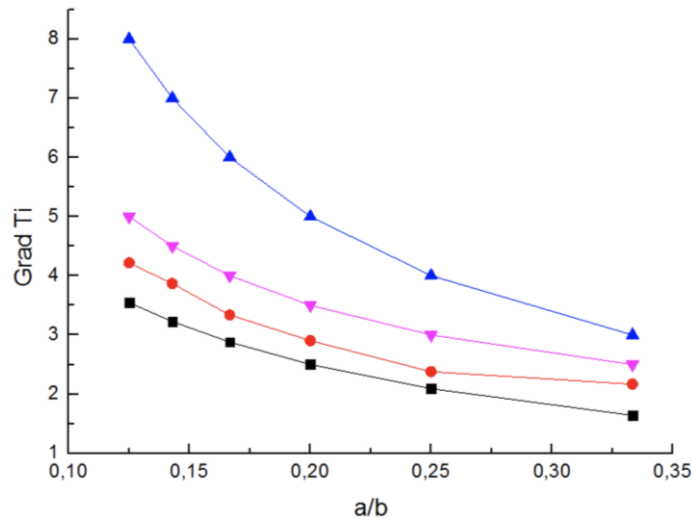


Рис. 1. Зависимость градиента температуры внутри включений от соотношения осей

Была написана программа для решения уравнения теплопроводности в трехмерной постановке методом конечных разностей и проведены соответствующие расчеты. Расчеты проводились для включений эллипсоидальной формы с разным соотношением осей. Синяя кривая представляет результаты формулы (1), розовая — формулы (2), черная — формулы (3). Результаты численных расчетов отображает красная кривая.

Полученная в настоящей работе формула (3) (черная кривая), учитывает теплофизические и геометрические свойства включений. Хорошее совпадение результатов численных и аналитических расчетов позволяет использовать полученное аналитическое выражение (3) для градиента температуры во включении эллипсоидальной формы для дальнейшего построения теории термомиграции жидких включений в соляных формациях.

### Литературы

1. Anthony T. R., Cline H. E. Thermal Migration of Liquid Droplets through Solids // J. Appl. Phys. 1971. V. 42. P. 3380–3387.
2. Аветисян А. Р., Корчагина О. О., Матвеев Л. В. Кинетическая модель эволюции жидких включений в соляных породах при высоких градиентах температуры // Радиоактивные отходы. 2022. № 18. С. 86–90.
3. Гегузин Я. Е., Дзюба А. С., Кружанов В. С. Исследование поведения жидких включений в кристалле в поле температурного градиента // Кристаллография. 1975. Т. 20. Вып. 2. С. 383–390

УДК 551.556.42

## Математическое моделирование влияния морской бризовой циркуляции на перенос и рассеяние радионуклидов в атмосфере

*Д. Ю. Гуляев*

Обнинский институт атомной энергетики — филиал НИУ МИФИ

Бризовая циркуляция в приморских регионах является одним из факторов, влияющих на степень загрязнения окружающей среды, в частности, на распространение в атмосфере радиоактивных примесей. Источником последних могут стать аварийные события на АЭС. Некоторые АЭС располагаются на близких расстояниях от побережья моря или океана (Куданкулам (Индия), Эль-Дабаа (Египет)). Температурный контраст между поверхностью суши и воды порождает явление бризовой циркуляции, заключающееся в возникновении движений воздуха, меняющих свое направление при смене времени суток. Для упомянутых случаев приморских АЭС при разработке систем принятия решений в ходе инцидентов становится одной из ключевых задач учет бризовой циркуляции. При решении такой задачи важно соблюсти баланс между стремлением к физически реалистичным результатам и к оперативности работы моделирующих систем, поскольку речь идет о работе с процессами, связанными с аварийными событиями, протекание которых требует быстрого принятия решений.

Процессы атмосферной циркуляции моделируются начально-краевой задачей для системы уравнений, описывающей мезомасштабную динамику атмосферы [1]. Среди начальных и граничных условий стоит выделить те, которые характеризуют бризовую циркуляцию. Первым таким условием является задание поверхностной температуры в виде периодической функции времени, позволяющее учесть суточный цикл изменения теплового режима, вызывающего смену направления бризового движения. Вторым важным условием является определение верхней границы области, в которой решается задача, в виде «материальной» поверхности, движущейся вместе с частицами воздуха. Искомые неизвестными при решении данной задачи являются пространственно-временные распределения компонент вектора скорости, потенциальной температуры, безразмерного давления, а также уровень материальной поверхности.

Указанная начально-краевая задача решается методом конечных разностей с помощью полуневяной схемы, описанной в [2]. Задача решается в двумерной постановке, однако предусмотрен переход на трехмерный режим, например при необходимости учитывать кривизну береговой линии. Размеры пространственной области, в которой решается задача, выбираются достаточно большими для того, чтобы охватить возможный масштаб развития циркуляции (горизонтальные — порядка нескольких сотен км, вертикальные — в пределах нескольких км). Область охватывает участки как суши, так и водной поверхности, на границе которых зарождается циркуляция. Начальные условия для метеорологических полей, которые предполагаются функциями только вертикальной координаты, определяются эмпирическими данными.

После получения распределений метеорологических величин проводится расчет диффузии выбросов в атмосфере. Для этого может быть непосредственно решено уравнение диффузии для концентрации каждой примеси или использована какая-либо упрощенная модель (например, локальная гауссова) [3]. По полученным распределениям концентраций радионуклидов рассчитываются величины, представляющие интерес с точки зрения контроля радиационной безопасности.

Программная реализация процедуры численного решения данной задачи создана на языке C++ в среде Visual Studio. Выходные результаты расчета могут быть представлены в виде линий тока, построенных по векторному полю скорости, распределений метеорологических и диффузионных величин на некоторой плоскости, одномерных (прежде всего, вертикальных) профилей величин.

Описанная расчетная процедура успешно прошла ряд проверок. Программа была протестирована на ряде задач, подобных исходной, сформулированных для некоторых идеализированных условий и допускающих аналитическое решение. В ходе вычислительных экспериментов было установлено, что расчетный алгоритм во всех случаях позволяет получить численные решения, достаточно близкие к аналитическим. На рис. 1 в качестве примера показано сравнение профилей некоторых величин, отражающее выявленный порядок близости решений. Поскольку исходная и упрощенная задачи близки по структуре,

можно предполагать, что выбор аппроксимаций входящих в уравнения дифференциальных операторов и масштабов сеточного разрешения являются удовлетворительными.

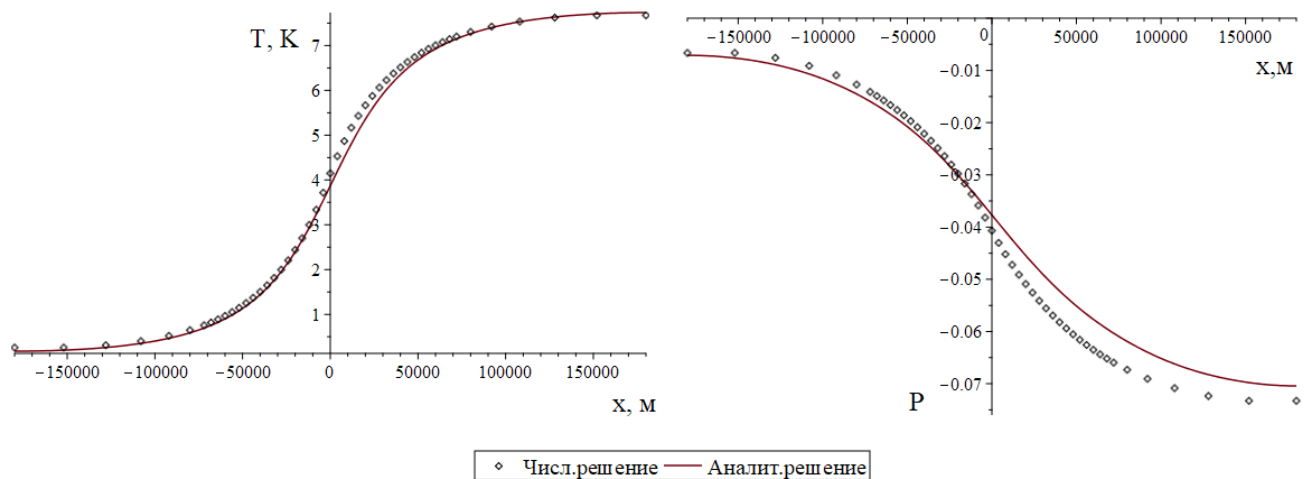


Рис. 1. Сравнение результатов численного и аналитического расчетов горизонтальных распределений мезомасштабных возмущений температуры (слева) и безразмерного давления (справа) на высоте 30 м после 7 часов времени интегрирования

Также в ходе вычислительных экспериментов было показано, что расчетная процедура корректно воспроизводит основные особенности бризовой циркуляции, следующие из общефизических соображений и анализа известных данных [4]. Так, например, результаты расчетов позволяют продемонстрировать формирование циркуляционных ячеек, развивающихся вблизи границы суши и водной поверхности, где наблюдается градиент поверхностной температуры. Также расчетный алгоритм позволяет фиксировать изменение направления ветра в прибрежной зоне в моменты смены времени суток (времена захода и восхода Солнца), когда изменяется режим поверхностного нагрева.

### Литература

1. *Pielke R. A.* Mesoscale meteorological modeling. — New York: Academic Press, 2013.
2. *Pielke R. A.* A three-dimensional numerical model of the sea breezes over south Florida // *Mon. Weather Rev.* 1974. V. 102. P. 115–139.
3. РД 52.18.717. Методика расчета рассеяния загрязняющих веществ в атмосфере при аварийных выбросах. — Обнинск: Принт-сервис, 2009. URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200105085> (дата обращения 13.03.2003).
4. *Horel J. D., Crosman E. T.* Sea and lake breezes: a review of numerical studies // *Boundary Layer Meteorol.* 2010. V. 137. P. 1–29.

---

# Секция электродинамики сложных систем и нанопотоники

---

Председатель: А. Н. Лагарьков (д. ф.-м. н., академик РАН)

Зам. председателя: А. П. Виноградов (д. ф.-м. н., профессор)

Секретарь: В. И. Полозов

---

Дата: 05.04.2023

Время: 10:00

УДК: 537.622.4

## Влияние формы и размеров частиц магнитных наполнителей на диэлектрическую проницаемость композитных материалов

*А. В. Долматов<sup>1,2</sup>, С. С. Маклаков<sup>1</sup>, Д. А. Петров<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Электродинамические характеристики композитов с магнитными микроразмерными включениями во многом определяются размером и формой частиц включений. Точное определение размеров и формы частиц порошковых наполнителей, а также распределения частиц по размерам, являются актуальными задачами для анализа и оптимизации свойств материалов в современной электродинамике.

Исследовали связь диэлектрической проницаемости (далее  $\epsilon'$ ) композитов на основе магнитных порошков с формой и размерами частиц включений. Рассчитывали статические значения  $\epsilon'$  для композитов с парафиновой матрицей и магнитными включениями сферической, несферической (камневидной) и плоской (чешуйки) формы с наполнением до 25 объемных процентов. Для аппроксимации  $\epsilon'$  композитов использовали формулу, выведенную с учетом слабого взаимодействия частиц в композите [1] (при малых концентрацией включений). Для больших концентраций наполнения, а также для учета формы частиц, использовали формулу смешения, описывающую эффективные параметры композита с учетом плотности распределения эффективных формфакторов частиц [2, 3]. Коэффициенты деполяризации частиц (далее  $N_i$ ), определяемые их геометрической формой, вычисляли, аппроксимируя частицы эллипсоидами (для которых  $N_i$  вычисляются аналитически [4]), а также параллелепипедами,  $N_i$  для которых брали из теоретической работы [5].

Для оценки размеров и форм частиц обрабатывали изображения с электронного и оптического микроскопов, для каждого типа порошков собирали статистику по 300 частицам. Для измерений частотных дисперсий комплексных диэлектрической и магнитной проницаемостей исследуемые порошки смешивали с парафином для получения композиционного материала [6]. Измерения проводили в коаксиальном волноводе, в диапазоне частот 0,1–20 ГГц, при помощи векторного анализатора цепей. Значения диэлектрической и магнитной проницаемостей композита определяли по измеренным значениям комплексных  $S$ -параметров.

Экспериментально показано, что композиты с более вытянутыми частицами имеют большее значение  $\epsilon'$ , также композиты с более крупными частицами имеют большее значение  $\epsilon'$ . Значения  $\epsilon'$ , рассчитанные по обеим формулам смешения, совпадают (с учетом погрешности) с экспериментальными данными при низких концентрациях (до 10% объемных). При более высоких концентрациях формула, учитывающая эффективное распределение формфакторов (по теории Бергмана–Милтона), лучше аппроксимирует экспериментальное значение  $\epsilon'$ , поскольку позволяет учитывать взаимодействие между отдельными частицами в композите. Оба способа аппроксимации несферических частиц (эллипсоиды и параллелепипеды) позволяют с высокой точностью рассчитывать коэффициенты деполяризации частиц. В обоих случаях вычисленное значение  $\epsilon'$  совпадает (с учетом погрешности) с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ) в рамках проекта № 21-19-00138.

## Литература

1. Landau L. D., Bell J. S., Kearsley M. J., Pitaevskii L. P., Lifshitz E. M., Sykes J. B. *Electrodynamics of continuous media*. — Amsterdam: Elsevier, 2013.
2. Bergman D. J., Stroud D. G. Physical Properties of Macroscopically Inhomogeneous Media // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1992. V. 46. P. 147–269.
3. Ghosh K., Fuchs R. Spectral theory for two-component porous media // *Phys. Rev. B.* 1988. V. 38(8). P. 5222–5236.
4. Sihvola A. H. *Electromagnetic mixing formulas and applications*. — London: Institution of Electrical Engineers, 1999.
5. Prozorov R., Kogan V. G. Effective demagnetizing factors of diamagnetic samples of various shapes // *Phys. Rev. Appl.* 2018. V. 10(1): 014030.
6. Dolmatov A. V., Maklakov S. S., Zezyulina P. A., Osipov A. V., Petrov D. A., Naboko A. S., Polozov V. I., Maklakov S. A., Starostenko S. N., Lagarkov A. N. Deposition of a SiO<sub>2</sub> shell of variable thickness and chemical composition to carbonyl iron: Synthesis and microwave measurements // *Sensors.* 2021. V. 21(14): 4624.

УДК 539.192

### Максимизация удельного потока между связанными квантовыми системами как прекурсор перехода в режим сильной связи

И. В. Вовченко<sup>1,2</sup>, А. А. Зябловский<sup>1,2,3,4</sup>, А. А. Пухов<sup>1,4</sup>, Е. С. Андрианов<sup>1,3,4</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН

<sup>3</sup>Всероссийский НИИ автоматизации им. Н. Л. Духова

<sup>4</sup>Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Рассмотрена система двух связанных двухуровневых систем, каждая из которых подключена к своему излучательному резервуару с заданной температурой. Исследована зависимость стационарного потока энергии между резервуарами в зависимости от константы связи между двухуровневыми системами в частично-секулярном, локальном и глобальном подходах. Показано, что удельный стационарный поток энергии: стационарный поток энергии, деленный на константу связи, имеет максимум по константе связи.

Особый интерес в контексте потока энергии представляет переход системы в режим сильной связи. Обычно он ассоциируется с переходом через особую точку [1]. Однако в случае ненулевой разницы частот двухуровневых систем или при равенстве скоростей диссипации двухуровневых систем, даже при нулевой константе связи, система формально будет находиться в режиме сильной связи. Показано, что в данных случаях максимизация удельного стационарного потока энергии происходит на ненулевой константе связи между подсистемами. В случае, когда разницы скоростей диссипации порядка самих скоростей диссипации, переход через особую точку системы происходит при той же (по порядку величины) константе связи между двухуровневыми системами.

Другим критерием перехода в режим сильной связи является расщепление спектра системы [2]. Показано, что (по порядку величин) расщеплению спектра предшествует максимизация потока энергии. Более того, константы, при которых происходят расщепление спектра, максимизация удельного потока и переход через особую точку, по порядку величины образуют равенство, эквивалентное теореме Пифагора.

Также показано, что в частично-секулярном и локальном подходах поток подавляется высокими скоростями диссипации, в противовес глобальному подходу, в котором поток растет линейно при увеличении скоростей диссипации.

## Литература

1. Miri M. A., Alù A. Exceptional points in optics and photonics // *Science.* 2019. V. 363(6422): eaar7709.
2. Sergeev T. T., Zyablovsky A. A., Andrianov E. S., Pukhov A. A., Lozovik Y. E., Vinogradov A. P. A new type of non-Hermitian phase transition in open systems far from thermal equilibrium // *Sci. Rep.* 2021. V. 11(1): 24054.

## Особые точки в волоконных лазерах с двухдефектным резонатором

Д. К. Высоких<sup>1</sup>, А. В. Дорофеев<sup>1,2,3</sup>, О. В. Бутов<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

<sup>3</sup>Институт радиотехники и электроники РАН

В последнее время большой интерес вызывают особые точки в различных физических системах [1]: в системах взаимодействующих магнанных волноводов [2], в лазерах [3] и т. д. В данной работе предложена система на основе Er/Yb волоконного лазера с двухдефектным резонатором, в которой предсказывается наличие двух особых точек при изменении мощности накачки (рис. 1). Расчеты проведены с учетом реальных параметров волоконной брэгговской решетки и активного волокна на основе Er/Yb.

Моды волоконного резонатора рассчитаны с использованием метода  $T$ -матриц. Определены комплексные частоты резонаторных мод. Показано, что изменение мощности накачки приводит к качественному изменению спектра, характерному для особой точки.

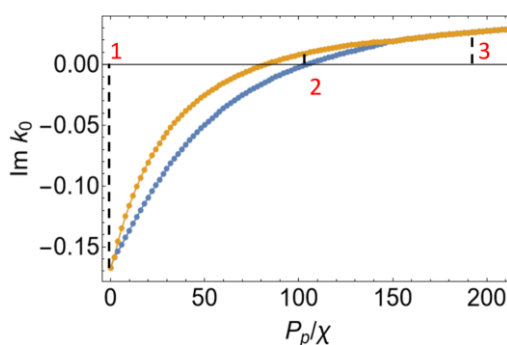


Рис. 1. Зависимость мнимой части собственных мод резонатора от мощности накачки

### Литература

1. Miri M.-A., Alù A. Exceptional points in optics and photonics // Science. 2019. V. 363(6422): eaar7709.
2. Sadovnikov A. V., Zyablovsky A. A., Dorofeev A. V., Nikitov S. A. Exceptional-point phase transition in coupled magnonic waveguides // Phys. Rev. Appl. 2022. V. 18(2): 024073.
3. Liertzer M., Ge L., Cerjan A. [et al.]. Pump-Induced Exceptional Points in Lasers // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 108(17): 173901.

## Майорановские состояния в допированных топологических изоляторах с нематической сверхпроводимостью

А. В. Капранов<sup>1,2,3</sup>, Р. Ш. Акзянов<sup>1,2,3</sup>, А. Л. Рахманов<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

<sup>3</sup>Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова

Топологические сверхпроводники проявляют множество необычных свойств, которые представляются интересными для приложений в области спинтроники и квантовых вычислений. В частности, в этих материалах предсказано и экспериментально подтверждено существование возбуждений типа фермионов Майораны. В нашей работе мы предложили один из возможных способов создать фермионы Майораны в топологических сверхпроводниках [1]. В качестве конкретной системы, в которой реализуется топологическая сверхпроводимость, нами рассмотрены допированные топологические изоляторы типа  $A_x\text{Bi}_2\text{Sc}_3$ , где  $A = \text{Cu}, \text{Nb}, \text{Sr}$ . На основе этих материалов уже созданы высококачественные монокристаллы, в которых надежно установлено существование топологической сверхпроводимости с векторным нематическим параметром порядка.



В топологическом сверхпроводнике в режиме нематической сверхпроводимости в  $E_u$ -представлении возможны различные типы вихрей. Первый тип связан с завихренностью в частично-дырочном пространстве и соответствует вихрю Абрикосова. Второй тип соответствует завихренности в спиновом пространстве и называется спиновым вихрем.

В данном докладе показано, что спиновой вихрь и вихрь Абрикосова притягиваются друг к другу и, как следствие, имеют общий кор. Они образуют аналог спин-массового вихря, существующего в жидком гелии. Для изучения электронных состояний в нематическом сверхпроводнике со спиновыми [1] и абрикосовскими вихрями [2] мы используем уравнения микроскопической теории, обобщенные на случай топологической сверхпроводимости Боголюбова–де Жена. Получено, что в случае спинового вихря существуют решения с нулевой энергией вблизи кора вихря, и эти состояния можно идентифицировать как пары Майорана–Крамера. В комбинированном вихре локализованных состояний с нулевой энергией нет [2].

Работа выполнена в рамках проекта РФФ №22-72-00032.

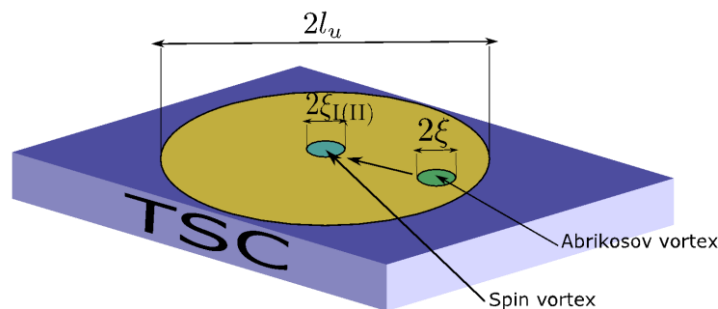


Рис. 1. Схематическое изображение системы. TSC — топологический сверхпроводник, желтым цветом обозначена деформированная область, зеленым — абрикосовский и спиновый вихри

### Литература

1. Akzyanov R. S., Rakhmanov A. L. Strain-induced spin vortex and Majorana Kramers pairs in doped topological insulators with nematic superconductivity // Phys. Rev. B. 2021. V. 104(9): 094511.
2. Kapranov A. V., Akzyanov R. S., Rakhmanov A. L. Interaction between spin and Abrikosov vortices in doped topological insulators // Phys. Rev. B. 2023. V. 107(13): 134515.

УДК 537.874+537.874.2

### Переключаемый воздействием температуры СВЧ экран на основе композита с включениями частиц Gd

И. В. Комаров<sup>1,2</sup>, С. Н. Старостенко<sup>1</sup>, Д. А. Петров<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

<sup>2</sup>Национальный исследовательский университет МЭИ

Гадолиний — ферромагнитный металл с температурой Кюри, близкой к комнатной. Композиты с включениями частиц Gd могут быть использованы как термопереключаемые СВЧ-экраны в радиоэлектронной аппаратуре. Исследование динамических магнитных характеристик таких композитов в зависимости от размеров и формы частиц гадолиния, а также от концентрации наполнителя в композите, при отсутствии внешнего магнитного поля и температуры, является актуальной задачей.

Исследовали композитные материалы с парафиновой матрицей, наполненные частицами Gd размером 2 мкм с объемным содержанием частиц 30%. Комплексные микроволновые диэлектрическую  $\epsilon$  и магнитную  $\mu$  проницаемости исследуемых образцов определяли с помощью векторного анализатора цепей (Keysight N5224B) в стандартных коаксиальных ячейках размером 7×3 мм. В диапазоне частот 0,3÷15 ГГц измерения проводили в коаксиальной воздушной линии с применением метода отражения и прохождения (Николсона–Росса). Толщина образцов тороидальной формы (шайб) для подобных измерений составляет около 1,5÷3 мм.

В диапазоне 10÷300 МГц измерения проводили в ячейке со съёмным короткозамыкателем с применением метода замкнутой линии (КЗ) для измерения магнитной проницаемости и метода открытой линии (ХХ) для измерения диэлектрической проницаемости. Толщина образца в этом случае составляет

10÷15 мм, а шайбы дополнительно подпрессовывались внутри ячейки для уменьшения воздушных зазоров между внешней поверхностью образца и элементами коаксиальной линии. Статические значения  $\epsilon$  и  $\mu$  определяли как медианные значения в диапазоне частот 10÷200 МГц, где потери пренебрежимо малы.

Получены кривые влияния изменения температуры на  $S$ -параметры слоя композита. Показано, что влияние температуры на спектр магнитной проницаемости композита описывается кластерной моделью намагничивания, основанной на формуле смещения Винера. Модель применена для расчета свойств СВЧ-экрана с управляемым коэффициентом отражения при охлаждении и нагревании. Согласно результатам расчета, на частоте 3,5 ГГц при уменьшении температуры с 25 до 5°C при толщине экрана 4,5 мм, коэффициент отражения падает с –2 дБ до –20 дБ.

Дальнейшее изучение композитов из исследуемой системы позволит разработать переключаемый внешним воздействием СВЧ-экран для решения проблем электромагнитной совместимости компонент радиоэлектронной аппаратуры.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-19-00138.

### Литература

1. *Starostenko S. N.* [et al.]. Effect of temperature on microwave permeability of an air-stable composite filled with gadolinium powder // *Sensors*. 2022. V. 22. № 8: 3005.

УДК 538.958

## Реконфигурируемое усиление экваториального магнитооптического эффекта Керра в Ми-резонансных кремний-никелевых нанорешетках

*К. А. Мамян, А. Ю. Фролов, И. В. Божьев, В. В. Попов, А. А. Федянин*

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Способность контролировать свойства света (интенсивность, поляризацию, фазу) является ключевым аспектом в создании фотонных устройств. В частности, интенсивность света можно модулировать с помощью экваториального магнитооптического эффекта Керра (ЭМОЭК) при приложении внешнего магнитного поля. В таких естественных средах, как ферромагнитные пленки, ЭМОЭК оказывается слишком малым по величине для практических целей. Ранее было предложено использовать магнитоплазмонные кристаллы в целях усиления данных эффектов за счет возбуждения поверхностных плазмон-поляритонов в проводнике. Однако такой метод влечет за собой большие потери из-за высокого поглощения в металле. Альтернативным способом усиления ЭМОЭК является использование Ми-резонансов в диэлектрических наноструктурах [1], т. е. мультипольных резонансов рассеяния, обладающих малыми омическими потерями в видимом и ближнем ИК-диапазонах. Характер этих резонансов существенно зависит от геометрии структуры.

В данной работе изучаются гибридные кремний-никелевые наноструктуры в виде массивов прямоугольных в сечении кремниевых нанонитей на подложке из никеля. Кремний был выбран из-за его высокого показателя преломления и малых потерь на поглощение в исследуемом диапазоне, а никель — благодаря его высокой магнитооптической активности.

В программном пакете Lumerical была создана модель данной структуры, и с помощью численного метода FDTD (метод конечных разностей во временной области) проведен ряд предварительных расчетов для определения оптимальных параметров решетки, после чего методами взрывной и электронно-лучевой литографии было изготовлено 8 образцов. Были экспериментально измерены спектрально-угловые зависимости коэффициента отражения и ЭМОЭК при изменении угла падения от 5° до 55°. Далее были определены углы падения света и длины волн, при которых наблюдалось максимальное значение ЭМОЭК. Для двух ключевых образцов 1 и 2 приведены экспериментальные и расчетные спектры коэффициента отражения и ЭМОЭК на рис. 1 и рис. 2 соответственно при угле падения в 50°.

В образце 1 (параметры  $w=215$  нм,  $h=180$  нм,  $p=720$  нм) пики ЭМОЭК наблюдаются в областях длин волн 725 нм и 860 нм. Им соответствуют минимумы в спектре отражения. С помощью построенных в пакете Lumerical (рис. 1в, г) картин ближнепольного распределения магнитного поля  $|\mathbf{H}|$  было установлено, что распределению поля соответствуют Ми-моды порядка  $TM_{21}$  и  $TM_{11}$  соответственно. Величина ЭМОЭК на длине волны 860 нм ( $TM_{11}$ ) составляет более 4%, что примерно в 40 раз больше, чем для обычной никелевой подложки (без нанонитей).

В образце 2 (параметры  $w=425$  нм,  $h=170$  нм,  $p=703$  нм) наблюдаются пики ЭМОЭК на длинах волн около 750 нм и 825 нм, которым соответствуют минимумы в спектре отражения, обусловленные возбуждением Ми-мод порядков  $TM_{21}$  и  $TM_{11}$  соответственно.

Образец 2 существенно отличается от образца 1 по своим геометрическим параметрам, при этом характер резонансов остается тем же. Действительно, пики ЭМОЭК наблюдаются при схожих длинах волн (725 нм и 750 нм для моды  $TM_{21}$ , 860 нм и 825 нм для  $TM_{11}$ ) и возбуждаются Ми-резонансами одинакового порядка, несмотря на существенное отличие в ширине образцов. Образец 1 с меньшей шириной, однако, позволяет достичь значительно большего усиления ЭМОЭК по сравнению с образцом 2.

Таким образом, экспериментально и численно продемонстрировано значительное усиление ЭМОЭК за счет возбуждения Ми-подобных резонансов в кремний-никелевых нанорешетках, спектрально перестраиваемое в зависимости от геометрических параметров образцов и характера резонансов.

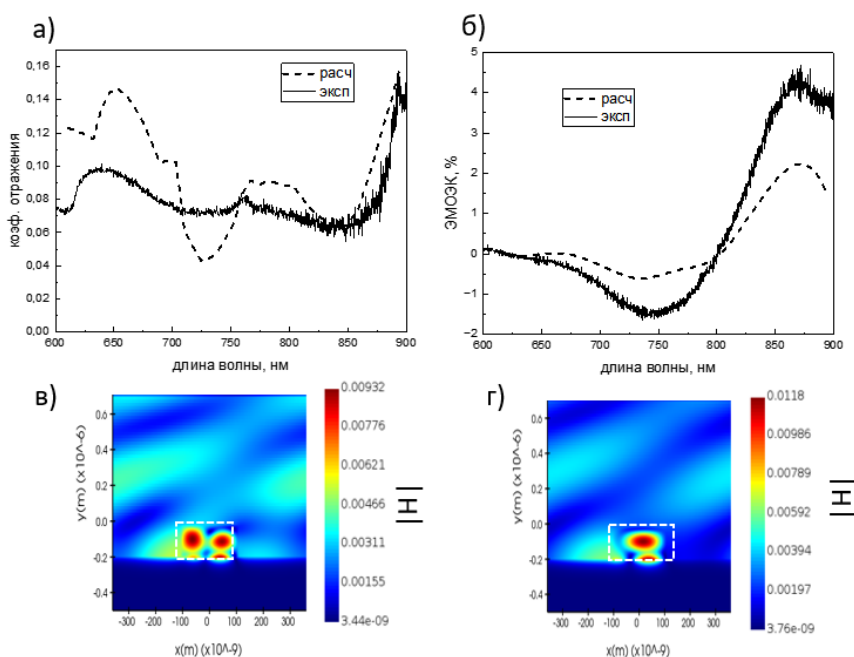


Рис. 1. Расчетный и экспериментальный спектры отражения (а) и ЭМОЭК (б) для образца 1 при угле падения  $50^\circ$ ; в, г — картины распределения поля  $|H|$  на длинах волн 725 нм и 860 нм при угле падения  $50^\circ$  соответственно; штриховая линия обозначает границы нанонити

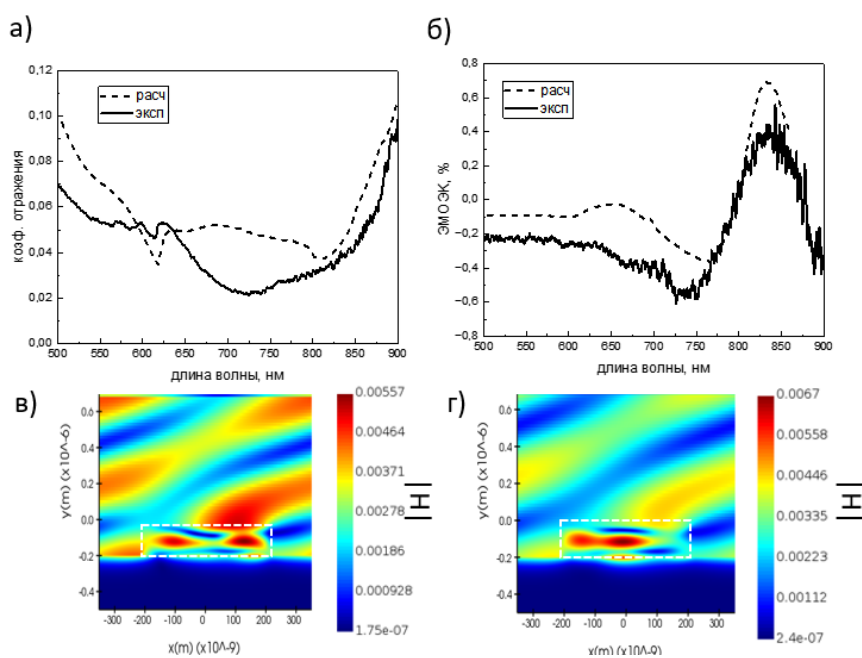


Рис. 2. Расчетный и экспериментальный спектры отражения (а) и ЭМОЭК (б) для образца 2 при угле падения  $50^\circ$ ; в, г — картины распределения поля  $|H|$  на длинах волн 750 нм и 825 нм при угле падения  $50^\circ$ ; штриховая линия обозначает границы нанонити

## Литература

1. Barsukova M. G. [et al.]. Magneto-Optical Response Enhanced by Mie Resonances in Nanoantennas // ACS Photonics 2017. V. 4. P. 2390–2395.

УДК 535.015

### Важность корреляций для особых точек и сильной связи

*И. С. Пашкевич<sup>1</sup>, И. В. Доронин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова

Исследуется влияние корреляций на свойства лазера в режиме сильной связи вблизи особой точки. Особая точка — это набор параметров системы, при котором несколько собственных значений и собственных векторов системы совпадают, и базис собственных векторов перестает быть полным. Благодаря своим необычным свойствам особые точки приводят к ряду интересных явлений в оптике, таких как однонаправленная невидимость, топологический перенос энергии и высокая чувствительность к изменению внешних параметров [1].

В качестве модели лазера используется микрорезонатор, в который помещена активная среда, занимающая субволновой объем внутри резонатора. Учет взаимодействия дипольного момента активных частиц с модой резонатора, а также учет некогерентной накачки и релаксационных процессов позволяют получить следующие уравнения на средние значения [2]:

$$\frac{dn}{dt} = -2\gamma_a n + 2N_{at}\Omega_R \varphi, \quad (1)$$

$$\frac{dD}{dt} = \gamma_P(1-D) - \gamma_D(1+D) - 4\Omega_R \varphi, \quad (2)$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\left(\gamma_\sigma + \gamma_a + \frac{\gamma_{cor}}{4}\right)\varphi + \frac{\Omega_R}{2}(D+1) + \Omega_R n D + (N_{at} - 1)\Omega_R s, \quad (3)$$

$$\frac{ds}{dt} = -(2\gamma_\sigma + \gamma_{cor})s + 2\Omega_R \varphi D, \quad (4)$$

где  $n$  — среднее число фотонов в резонаторе,  $D$  — средняя инверсия населенности активной среды,  $\varphi$  — средняя величина потока энергии между атомом и ЭМ полем,  $s$  — пространственные корреляции между поляризациями двух активных атомов, усредненные по всем парам атомов,  $N_{at}$  — число атомов в активной среде,  $\Omega_R$  — константа связи между отдельным атомом и резонатором,  $\gamma_a$  — скорость релаксации ЭМ поля,  $\gamma_D$  и  $\gamma_\sigma$  — скорости продольной и поперечной релаксации атомов,  $\gamma_P$  — скорость накачки активной среды,  $\gamma_{cor}$  — дополнительная скорость релаксации корреляций.

Была проведена линеаризация уравнений (1)–(4) около стационара  $(n_{st}, \varphi_{st}, s_{st})$  при постоянной инверсии населенностей  $D = D_0$ . В линеаризованной системе уравнений найдены зависимости собственных значений и собственных векторов полученной системы от  $D_0$ . Обнаружено, что при  $\gamma_{cor} = 0$  все три собственных значения равны и три соответствующих собственных вектора коллинеарны вблизи  $D_0 = 0$ , что означает наличие особой точки третьего порядка. При  $\gamma_{cor} > 0$  исчезает точка, в которой собственные значения совпадают, а собственные векторы перестают быть коллинеарными, таким образом, особая точка исчезает. При этом с ростом  $\gamma_{cor}$  различие между собственными векторами и собственными значениями увеличивается.

Таким образом, показано, что корреляции между поляризациями активных частиц играют важную роль в формировании особой точки в системах на основе активной среды и резонатора, а при разрушении корреляций особая точка исчезает. Этот эффект может быть важен для изучения систем с особыми точками, а также для систем, в которых играют роль корреляции между активными частицами, таких как связанные кубиты.

## Литература

2. *Miri M.-A., Alù A.* Exceptional points in optics and photonics // Science. 2019. V. 363(6422): eaar7709.
3. *Zyablovsky A. A.* [et al.]. Long-range atomic correlations as a source of coherent light generation // Opt. Lett. 2021. V. 46. P. 5292–5295.

УДК 51.73

### Анализ ГКР спектров ангиотензин-превращающего фермента человека с помощью методов статистики и линейного дискриминантного анализа

*Р. Р. Сафиуллин<sup>1,2</sup>, И. А. Богинская<sup>1</sup>, Н. Л. Нечаева<sup>3</sup>, В. Е. Тихомирова<sup>4</sup>, О. В. Крюкова<sup>4</sup>, О. А. Кост<sup>4</sup>, К. Н. Афанасьев<sup>1</sup>, И. А. Рыжиков<sup>1</sup>, Н. И. Булаева<sup>5</sup>, Е. З. Голухова<sup>5</sup>*

<sup>1</sup>Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup>Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН

<sup>4</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

<sup>5</sup>Национальный медицинский исследовательский центр сердечно-сосудистой хирургии им. А. Н. Бакулева

С помощью метода спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) можно определить ферменты и белки в плазме крови человека, что позволяет оценить состояние организма при различных заболеваниях [1]. Одним из таких ферментов является ангиотензин-превращающий фермент (АПФ), продуцируемый клетками сердца. Для разработки метода его определения, были выделены и очищены АПФ из разных тканей и жидкостей организма человека (сердца, легких и семенной жидкости), и получены их ГКР спектры на планарных наноструктурированных тонких пленках серебра [2]. Для анализа полученного спектрального массива трех видов АПФ была использована модель линейного дискриминантного анализа [3]. С помощью него удалось получить представление спектра в пространстве более низкой размерности по сравнению с исходной. Показано, что спектры различных АПФ в нем эффективно делимы. С помощью свойства линейности классификатора проведена оценка вкладов спектральных признаков в разделение различных видов АПФ и определены интервалы с их максимальными значениями, что показано на рис. 1.

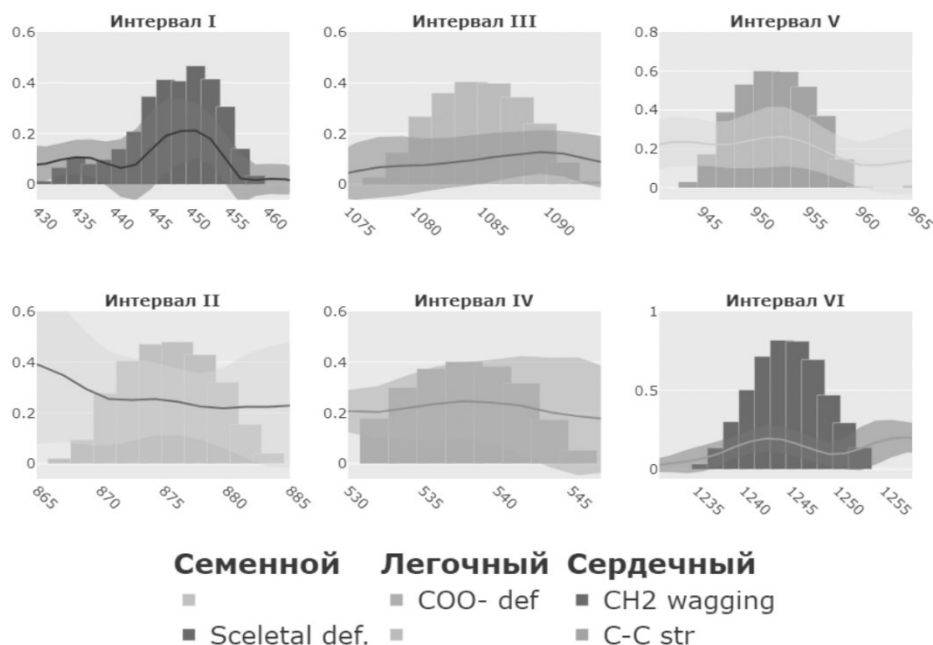


Рис. 1. Интервалы, вносящие максимальный вклад в разделение спектров АПФ

Далее был проведен вычислительный эксперимент по измерению точности классификации в зависимости от числа используемых моделью полос в порядке убывания их важности [4], в котором было показано, что уже на основе первых трех интервалов (~25 полос), удается успешно разделить АПФ, продуцируемые различными типами клеток. При дальнейшем увеличении числа используемых полос значение точности стремится к предельным значениям.

## Литература

1. *Nechaeva N.* [et al.]. Multiscale flaked silver SERS-substrate for glycated human albumin biosensing // *Anal. Chim. Acta.* 2020. V. 1100. P. 250–257.
2. *Boginskaya I.* [et al.]. SERS-active substrates nanoengineering based on e-beam evaporated self-assembled silver films // *Appl. Sci.* 2019. V. 9: 3988.
3. *Barucci A.* [et al.]. Label-free SERS detection of proteins based on machine learning classification of chemo-structural determinants // *Analyst.* 2021. V. 146(2). P. 674–682.
4. *Gyftokostas N.* [et al.]. Laser-induced breakdown spectroscopy coupled with machine learning as a tool for olive oil authenticity and geographic discrimination // *Sci Rep.* 2021. V. 11(1): 5360.

УДК 535.14

### Условный (heralded) однофотонный источник на основе спонтанного рамановского рассеяния

*И. В. Панюков<sup>1,2</sup>, В. Ю. Шишков<sup>1,2,3</sup>, Е. С. Андрианов<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова

<sup>3</sup>Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

В недавних экспериментальных [1, 2] и теоретических работах [3, 4] было показано, что стоксова и антистоксова компоненты света, полученного при спонтанном рамановском рассеянии на колебаниях ядер молекул, обладают сильными взаимными корреляциями. Это делает возможным рассматривать рамановские молекулы как потенциальную платформу для создания условных однофотонных источников. Более того, типичные частоты колебаний ядер молекул лежат в диапазоне от 10 ТГц до 100 ТГц [5], что делает возможным создание условного однофотонного источника при комнатных температурах, в то время как многие системы, на основе которых реализуются условные однофотонные источники, требуют криогенных температур. Большое разнообразие молекул, демонстрирующих неклассические взаимные корреляции между стоксовой и антистоксовой составляющими рассеянного света [1, 2], может обеспечить гибкость данных систем для внедрения однофотонных источников света в будущем. Однако, несмотря на очевидные преимущества таких систем, насколько нам известно, реализация заявленного однофотонного источника, основанного на спонтанном рамановском рассеянии света на ансамбле молекул, еще не продемонстрирована.

В этой работе мы рассматриваем условный однофотонный источник, основанный на спонтанном рамановском рассеянии на ансамбле молекул. Мы показываем, что при использовании стоксова рассеянного света для последующей постселекции антистоксова рассеянного света последний может обладать однофотонными свойствами. Используя формализм совместных вероятностей наличия в рассеянном свете определенного числа стоксовых и антистоксовых фотонов, мы получаем выражения для эффективности и автокорреляционной функции второго порядка условного однофотонного источника. Мы анализируем влияние различных негативных факторов на характеристики условного однофотонного источника, которые включают временную задержку между стоксовыми и антистоксовыми сигналами и фоновое излучение. Мы показываем, что близкое к нулю значение автокорреляционной функции второго порядка имеет место даже тогда, когда поток некоррелированных фотонов на порядок превышает поток коррелированных фотонов в рассеянном рамановском свете.

## Литература

1. *Saraiva A.* [et al.]. Photonic counterparts of cooper pairs // *Phys. Rev. Lett.* 2017. V. 119(19): 193603.
  2. *Bustard P. J.* [et al.]. Nonclassical correlations between terahertz-bandwidth photons mediated by rotational quanta in hydrogen molecules // *Opt. Lett.* 2015. V. 40(6). P. 922–925.
  3. *Shishkov V. Y.* [et al.]. Enhancement of Stokes–anti-Stokes correlations by the classical incoherent incident light // *Phys. Rev. A.* 2021. V. 103(1): 013514.
  4. *Thapliyal K., Peřina J.* Ideal pairing of the Stokes and anti-Stokes photons in the Raman process // *Phys. Rev. A.* 2021. V. 103(3): 033708.
- Keresztury G.* Raman spectroscopy: Theory // *Handbook of vibrational spectroscopy.* — Hoboken: Wiley, 2006. P. 71–87.

Председатель: А. Г. Панин (к. ф.-м. н.)

Зам. председателя: Э. В. Бугаев (д. ф.-м. н.)

Секретарь: А. И. Шабанов

---

Дата: 03.04.2023 и 04.04.2023

Время: 10:00

УДК 539.1.07

## Электромагнитный калориметр эксперимента ALICE3 на Большом адронном коллайдере

*Е. В. Амбарцумян<sup>1</sup>, Ю. В. Харлов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт» — ИФВЭ

После модернизации Большого адронного коллайдера в 2035 г. запланирован новый детектор ALICE3 [1] по изучению свойств кварк-глюонной материи, образующейся в столкновении тяжелых ионов. Концептуальный проект ALICE3 состоит из кремниевого трекера, детектора измерения времени пролета TOF и черенкового детектора RICH, электромагнитного калориметра ECal, помещенных в сверхпроводящий соленоидальный магнит, а также детектора идентификации мюонов.

В данной работе рассматривается электромагнитный калориметр ECal, предназначенный для измерения спектров образования прямых фотонов и нейтральных мезонов, распадающихся на фотоны, в том числе состояний чармония  $\chi_c$ . Детектор ECal будет состоять из сектора с высоким энергетическим разрешением для регистрации мягких фотонов, выполненного из кристаллов вольфрамата свинца  $PbWO_4$ , и сектора сэмпингового калориметра из чередующихся слоев свинца и органического сцинтиллятора для измерения фотонов высоких энергий. В работе рассматривается моделирование быстрого отклика калориметра на фотоны, электроны, мюоны и адроны и реализация отклика в пакете моделирования установки DelphesO2 [2]. Отклик ECal на фотоны был настроен на воспроизведение характеристик действующего калориметра PHOS эксперимента ALICE [3], в частности, на воспроизведение энергетического и пространственного разрешения калориметра и характеристик регистрации  $\pi^0$ -мезонов. Моделирование процессов образования  $\pi^0$ -мезонов проведено с помощью генератора событий одиночного  $\pi^0$ -мезона с заданным импульсом, а также генератора Pythia8 [4] в pp-столкновениях при энергии 14 ТэВ. Свойства ECal определялись через массовое разрешение  $\pi^0$  в моде распада на два фотона.

Для моделирования детектора были использованы геометрические и энергетические характеристики, определенные в концептуальном проекте ALICE3 [1]. Планируется, что ECal покроет диапазон псевдобыстрот  $-1,6 < \eta < 4$ . Калориметр делят на две части. Центральная часть ECal имеет вид цилиндра, охватывает весь азимутальный угол и имеет внутренний и внешний радиус 1,15 м и 1,45 м соответственно. Его длина 7 м охватывает диапазон псевдобыстрот  $|\eta| < 1,6$ . Сегмент, обеспечивающий прецизионные измерения энергии кристаллами  $PbWO_4$ , охватывает  $|\eta| < 0,33$  по псевдобыстроте, что соответствует длине 1,28 м. Торцевая часть, установленная на дистанции 0,85 м от центральной части, выполнена в виде диска с внутренним радиусом 0,16 м и внешним радиусом 1,8 м с толщиной 0,3 м. Зависимость энергетического разрешения калориметра от энергии фотона параметризуется как

$$\sigma_E = E \sqrt{\frac{a^2}{E^2} + \frac{b^2}{E} + c^2}. \quad (1)$$

Первый член  $a$  определяется шумом фотодетектора и считывающей электроникой, второй —  $b$  (так называемый стохастический член) — определяется статистическими флуктуациями числа зарегистрированных в фотодетекторе фотоэлектронов; третий член  $c$  связан с потерями света в материале ячеек калориметра. Для сектора ECal из сэмпинговых модулей выбраны параметры  $a = 0,02$  ГэВ,  $b = 0,095$  ГэВ<sup>1/2</sup>,

$c = 0,01$ , а прецизионной сектор из  $\text{PbWO}_4$  имеет улучшенное энергетическое разрешение:  $a = 0,002 \text{ ГэВ}$ ,  $b = 0,02 \text{ ГэВ}^{1/2}$ ,  $c = 0,01$ .

Мы разделяем калориметр на три зоны — центральную обычную, центральную прецизионную и торцевую, формально считая, что они оперируют отдельно и независимо от друг друга. Реконструкция  $\pi^0$ -мезонов основана на спектрах инвариантных масс пар фотонов, зарегистрированных в ECal. Свойства  $\pi^0$ -мезонов были получены на основе моделирования 10 млн событий  $pp$ -столкновений при  $\sqrt{s} = 4 \text{ ТэВ}$  генератором Pythia8. Все фотоны события проходили через процедуру моделирования отклика ECal, описанную выше, и были построены спектры инвариантных масс всех комбинаций пар фотонов, попадающих в соответствующие зоны калориметра. На рис. 1 изображены спектры инвариантных масс пар фотонов и реконструкция  $\pi^0$  в разных зонах калориметра при значении поперечного импульса  $p_T = 1 \text{ ГэВ}/c$ . Реконструкция проводится аппроксимацией спектров инвариантных масс суммой функции Гаусса, описывающей пик  $\pi^0$ , и полинома третьей степени, описывающего непрерывный комбинаторный фон. Мас-совое разрешение реконструированных  $\pi^0$ -мезонов, определяющееся параметром  $\sigma$  функции Гаусса, показано на рис. 2 как зависимость ширины реконструированного  $\pi^0$ -мезона от поперечного импульса.

Для улучшения модели калориметра ECal в дальнейшем планируется:

- введение в DelphesO2 отклика ECal на лептоны и заряженные адроны;
- добавление алгоритма для идентификации электронов;
- изучение характеристик регистрации мезонов  $\chi_{c1}$ ,  $\chi_{c2}$ ,  $J/\psi$ .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-42-04405.

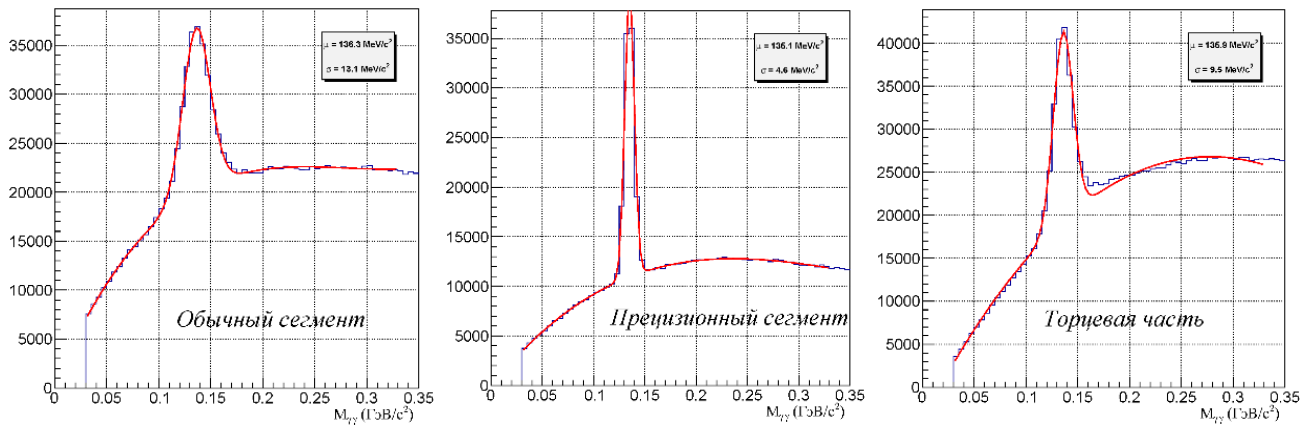


Рис. 1. Спектры инвариантных масс пар фотонов при значении продольного импульса 1 ГэВ и реконструкция  $\pi^0$  в трех зонах детектора (слева направо: обычный и прецизионный сегменты центральной части калориметра, торцевая часть)

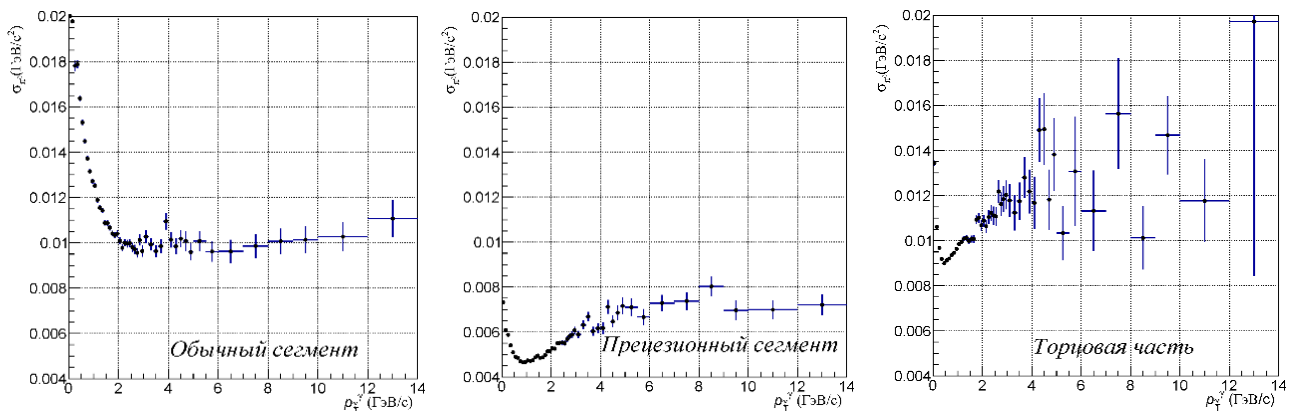


Рис. 2. Зависимость ширины  $\pi^0$ -мезона от продольного импульса до 14 ГэВ в трех зонах детектора (слева направо: обычный и прецизионный сегменты центральной части калориметра, торцевая часть)

## Литература

1. Luciano M., Werner R. Letter of intent for ALICE 3: A next generation heavy-ion experiment at the LHC: Tech. rep. — CERN, Geneva: ALICE Collaboration, 2022. arXiv: 2211.02491v1.
2. Interfacing Delphes with the AliceO2//GitHub [Электронный портал]. URL.: <https://github.com/kharlov/DelphesO2> (дата обращения 13.03.2023).



3. Acharya S. [et al.]. Calibration of the photon spectrometer PHOS of the ALICE experiment // J. Inst. 2019. V. 14(05): P05025. DOI: 10.1088/1748-0221/14/05/P05025.
4. Bierlich C., Chakraborty S., Desai N. [et al.]. A comprehensive guide to the physics and usage of PYTHIA 8.3 // SciPost Physics Codebases 8. 2022. DOI: 10.21468/SciPostPhysCodeb.8.

УДК 539.123

## Этапы моделирования прототипа Баксанского большого нейтринного телескопа

*А. А. Будзинская<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Институт ядерных исследований РАН

<sup>2</sup>Московский педагогический государственный университет, Институт физики, технологии и информационных систем

Баксанский большой нейтринный телескоп — это жидкосцинтилляционный нейтринный телескоп с предполагаемой массой мишени 10 кт, который будет создан на Северном Кавказе в Баксанской нейтринной обсерватории Института ядерных исследований Российской академии наук (БНО РАН). Данный нейтринный детектор нацелен на широкий спектр задач: основная цель — это измерение потока геонейтрино для оценки вклада радиоактивных изотопов в общий тепловой поток Земли [1], также будет возможна регистрация потоков нейтрино CNO цикла Солнца, потоков антинейтрино от ядерных реакторов, а также астрофизических источников и изучение взрывов сверхновых. Детектор будет расположен в лаборатории галлий-германиевого нейтринного телескопа в БНО ИЯИ РАН на глубине около 4700 м. в. э. (метр водного эквивалента). Конструкция детектора будет состоять из трех зон: центральная — акриловая сфера, заполненная жидким сцинтиллятором, которая будет окружена второй зоной из несцинтиллирующей органической жидкости для защиты от фона материалов детектора, и внешняя зона, заполненная сверхчистой водой, которая будет выполнять роль черенковского детектора для регистрирования космических мюонов [2].

Моделирование детектора осуществляется с помощью методов Монте-Карло в Geant 4, который является фреймворком и программным обеспечением для моделирования прохождения элементарных частиц через вещество и их взаимодействия с веществом. Geant 4 разработан на объектно-ориентированном языке программирования C++.

На данном этапе создается модель рождения и взаимодействия фотонов со сцинтиллятором. Следующими стадиями является моделирование более сложной конструкции детектора, включающей второй слой и третий — внешний — слой, заполненный водой высокой степени очистки, моделирование фотоумножителей.

## Литература

1. Ludhova L., Zavatarelli S. Studying the Earth with Geoneutrinos. Advances in High Energy Physics // Adv. High Energy Phys. 2013. V. 2013: 425693.
2. Ushakov N.A. [et al.]. A new Baksan Large Neutrino Telescope: the project's status // J. Phys. Conf. Ser. 2021. V. 1787: 012037.

УДК 539.1.08

## Расчет электромагнитных характеристик полосковых датчиков положения пучка для линейных резонансных ускорителей ионов

*В. Е. Амосова<sup>1,2</sup>, С. А. Гаврилов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт ядерных исследований РАН

Для измерения поперечного положения пучка в ускорителях заряженных частиц часто используют емкостные датчики, принцип работы которых основан на измерении токов изображения, индуцированных электрическим полем пучка в изолированных металлических электродах [1]. В зависимости от рабочих параметров пучка такие датчики можно разделить на три принципиально разных типа: кнопочные, полосковые и разрезные, при этом на линейных резонансных ускорителях ионов с малой длительностью

сгустков наибольшее распространение получили датчики полоскового типа благодаря относительно большим амплитудам и минимальным искажениям измеряемых сигналов.

Полосковый датчик состоит из согласованной с коаксиальными выводами полосковой линии, передаточный импеданс которой является ключевой характеристикой устройства (рис. 1). Для тока пучка, распределенного по Гауссу, он определяется по формуле (1) и зависит от длительности пучка, его скорости и геометрии электрода:

$$Z_t(\omega) = \frac{Z_0 \alpha i}{2 \cdot 2\pi} \exp\left(-\frac{\sigma_t^2 \omega^2}{2}\right) \cdot e^{-\frac{i\omega l}{c}} \cdot \sin(\omega l/c) \quad (1)$$

Для анализа рабочих электромагнитных характеристик полоскового датчика была реализована модель в ПО COMSOL Multiphysics с использованием модулей AC/DC и радиочастоты.

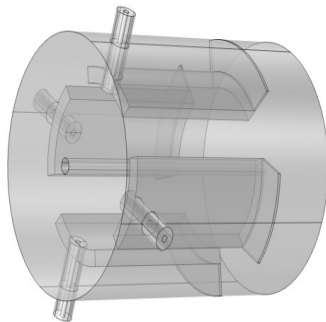


Рис. 1. Геометрия датчика положения пучка

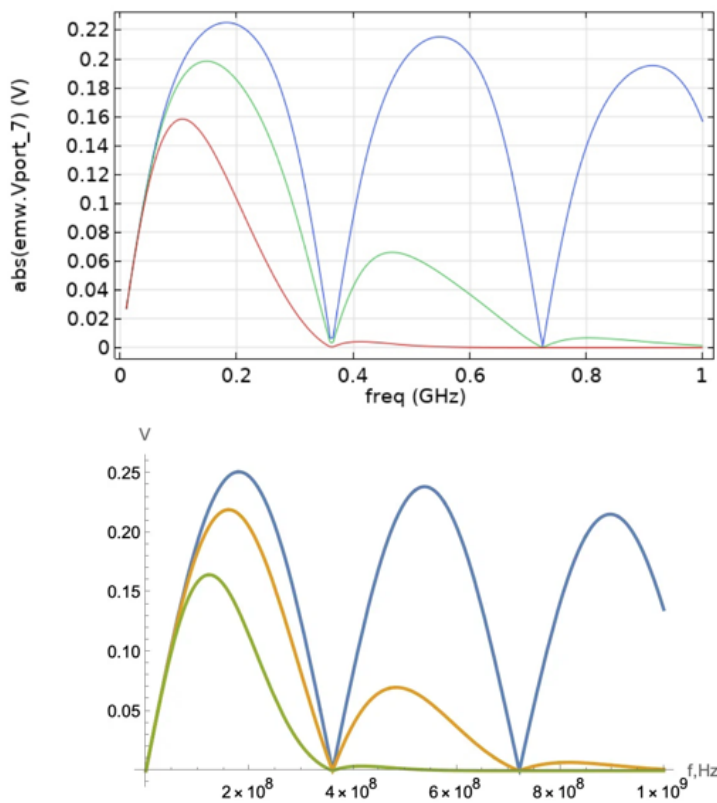


Рис. 2. Передаточный импеданс для длины электрода  $l = 0,4$  м, радиуса трубы 16 мм, углового размера электрода  $60^\circ$ . Длительности импульсов 0,1; 0,5; 1 нс (на верхнем рисунке синяя, зеленая и красная линии соответственно)

Для согласования полосковой линии со входами считывающей электроники проведен электростатический расчет емкости в модуле AC/DC.

С помощью численного моделирования в модуле радиочастоты получена зависимость передаточного импеданса от частоты для различных длин электродов и длительностей импульса. Пример расчета для импульса тока, распределенного по Гауссу, представлен на рис. 2. Моделирование позволяет определить оптимальную полосу пропускания частот считывающей электроники и амплитуду сигнала, т. е. решить задачу оптимизации геометрии для заданных параметров пучка.

## Литература

1. Forck P. Beam Instrumentation and Diagnostics // arXiv preprint. [2020]. arXiv: 2009.10411.
2. Wendt M. BPM systems: A brief introduction to beam position monitoring // arXiv preprint. [2020]. arXiv: 2005.14081.

УДК 539.126.4

### Поиск Новой физики в прямом CP-нарушении в интерференции древесных $b \rightarrow c\bar{s}$ и пингвинных $b \rightarrow s\bar{s}$ амплитуд

Д. С. Гаврилов<sup>1,2,3</sup>, А. Е. Бондарь<sup>4,5</sup>, П. Н. Пахлов<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

<sup>4</sup>Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН

<sup>5</sup>Новосибирский государственный университет (национальный исследовательский университет)

В Стандартной модели CP-нарушение обусловлено единственной неприводимой комплексной фазой в матрице Кабиббо–Кобаяши–Маскавы [1], а значит, всевозможные эксперименты с CP-нарушением в рамках СМ должны давать коррелированные результаты. В частности, непрямое CP-нарушение в распадах В-мезонов, вызванных переходом  $b \rightarrow s\bar{s}$ , параметризуется тем же углом Треугольника унитарности  $\beta$ , что и в древесных переходах  $b \rightarrow c\bar{s}$ . Прямое CP-нарушение в этих модах ожидается сопоставимым с нулем. Значимое отклонение от этих ожиданий может свидетельствовать о вкладе Новой физике за пределами СМ. Одним из интересных распадов, обусловленных  $b \rightarrow s\bar{s}$  переходом, является распад  $B \rightarrow \phi K$ .

Проведен анализ возможности поиска Новой физики в прямом и непрямом CP-нарушениях в пингвинной  $b \rightarrow s\bar{s}$  амплитуде распада  $B \rightarrow \phi K$ . Для вывода параметров CP-нарушения использовались амплитуды распадов  $B^0$  и  $\bar{B}^0$ -мезонов с добавлением некоторого вклада Новой физики, содержащего неизвестные сильную и слабую фазы. Также было учтено, что амплитуды распада  $B^0$  и  $\bar{B}^0$  равны в рамках Стандартной модели. Таким образом, квадрат амплитуды имеет вид

$$|a + be^{i(\delta \pm \phi)}|^2, \quad (1)$$

здесь  $a, b$  — пингвинные амплитуды СМ и НФ соответственно,  $\delta, \phi$  — сильная и слабая фазы.

Получены формулы для синуса двойного угла треугольника унитарности  $\sin 2\beta_{\text{эфф}}$  и разности относительных ширин распада  $B(\bar{B}) \rightarrow \phi K, A$ . Эти величины зависят от трех параметров Новой физики: относительного модуля амплитуды  $r$ , слабой  $\phi$  и сильной  $\delta$  фаз. В Стандартной модели ожидается, что  $\sin 2\beta_{\text{эфф}}$  и  $A$  равны  $\sin 2\beta$  и 0 соответственно [2]. Чувствительность к проявлениям НФ достигается, если слабая фаза амплитуды Новой физики отличается от таковой в Стандартной модели.

Однако сильная фаза может оказаться такой, что она усложнит возможность наблюдения вклада Новой физики. На рис. 1 показана разрешенная область параметров  $r$  и  $\phi$  по результатам экспериментов Belle [3] и BaBar [4] (CL=90%). Видно, что данные позволяют исключить лишь малую область параметров с большими относительными амплитудами именно из-за неопределенности сильной фазы. Таким образом, канал  $B \rightarrow \phi K$  оказывается недостаточно эффективным для поиска НФ в CP-нарушении.

В настоящей работе предлагается иной способ поиска физики вне Стандартной модели в прямом CP-нарушении в распаде  $B^+ \rightarrow K^+K^+K^-$ . Предлагаемый метод основывается на использовании интерференции между пингвинной  $\bar{b} \rightarrow s\bar{s}$  и древесной  $\bar{b} \rightarrow c\bar{s}$  диаграммами, приводящими к одному и тому же конечному состоянию. Это достигается за счет присутствия в древесной диаграмме промежуточного резонанса  $\chi_{c0}(1P)$ , распадающегося в  $K^+K^-$  в s-волне. Таким образом, для обеих амплитуд конечным состоянием является  $K^+K^+K^-$ . В отличие от канала  $B \rightarrow \phi K$ , где слабая фаза пингвинной амплитуды входит как параметр непрямого CP-нарушения, а затем сравнивается с независимым измерением слабой фазы древесной амплитуды, в нашем методе определяется непосредственно разность этих двух фаз.

В рамках разработки метода поиска Новой физики была выведена формула для амплитуды распада  $B^+ \rightarrow K^+K^+K^-$  с учетом промежуточного резонанса  $\chi_{c0}(1P)$  для древесной диаграммы. Помимо амплитуды СМ учтен вклад НФ с неизвестными амплитудой и фазами (сильной и слабой) в пингвинную диаграмму. Дополнительная сложность возникает из-за корреляции Бозе–Эйнштейна между идентичными  $K^+$ -

мезонами в случае промежуточного резонанса  $\chi_{c0}(1P)$ , распадающегося на  $K^+K^-$ . Вероятности распада для  $B^+$  и  $B^-$  имеют вид

$$\left| a + be^{i(\delta \pm \phi)} + \frac{1}{2}[A_{BW}(m_{13}) + A_{BW}(m_{23})]e^{i\gamma} \right|^2, \quad (2)$$

здесь  $A_{BW}$  — амплитуды Брейта–Вигнера,  $\gamma$  — относительная фаза между диаграммами.

Полученная формула (2) позволяет оценивать вклад в распределение на диаграмме Далица от введенной амплитуды Новой физики и его зависимость от сильной и слабой фаз. Кроме того, появляется возможность наблюдать возникающее прямое CP-нарушение в распадах B-мезонов на три K-мезона.

Планируется оценить эффективность извлечения параметров Новой физики с помощью предложенного метода. Проводится моделирование методом Монте-Карло исследуемого распада с учетом вклада Новой физики в условиях реального детектора с неидеальным разрешением. Подгонка смоделированных данных теоретической функцией даст оценку точности измерения параметров НФ.

Преимущество данного метода заключается в том, что благодаря наличию резонанса с существенной шириной достигается возможность избежать «скрытой» амплитуды НФ, поскольку разность сильных фаз между амплитудами Новой физики и Стандартной модели меняется вблизи полюса резонанса  $\chi_{c0}(1P)$  во всем диапазоне, а значит, НФ проявится в некоторой области распределения Далица.

Предложенный метод может быть применен в экспериментах Belle, Belle II и LHCb.

Работа П. Н. Пахлова выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ. Д. С. Гаврилов благодарит Российский научный фонд за поддержку по договору 22-22-00564.

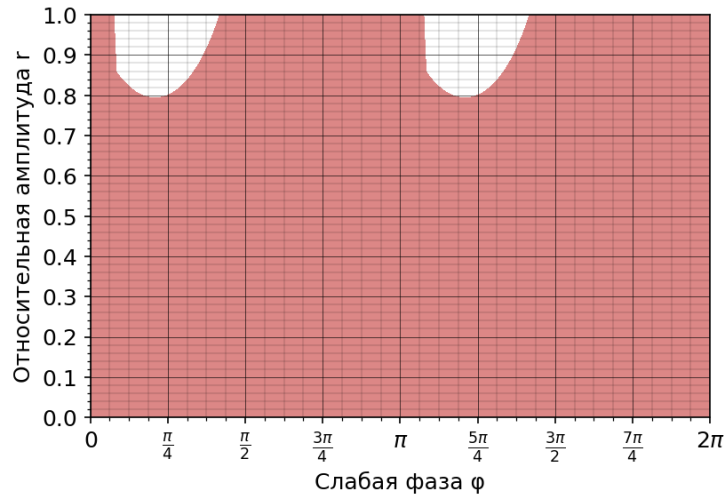


Рис. 1. Разрешенная область при любой сильной фазе

### Литература

1. Kobayashi M., Maskawa T. CP-violation in the renormalizable theory of weak interaction // Prog. Theor. Phys. 1973. V. 49(2). P. 652–657.
2. Gronau M., Rosner J. L., Zupan J. Predictions for  $\sin 2(\beta/\phi_1)_{\text{eff}}$  in  $b \rightarrow s$  penguin dominated modes // Phys. Rev. D. 2006. V. 74: 093003.
3. Nakahama Y. [et al.]. Measurement of CP violating asymmetries in  $B^0 \rightarrow K^+K^+K_s$  decays with a time-dependent Dalitz approach // Phys. Rev. D. 2010. V. 82: 073011.
4. Lees J. P. [et al.]. Study of CP violation in Dalitz-plot analyses of  $B^0 \rightarrow K^+K^+K_s^0$ ,  $B^+ \rightarrow K^+K^-K^+$ , and  $B^+ \rightarrow K^0sK^0sK^+$  // Phys. Rev. D. 2012. V. 85: 112010.

## Детектирование $\Sigma^0$ -гиперона в протон-протонных столкновениях с энергией 13 ТэВ на эксперименте ALICE на LHC

*Н. О. Гладин, С. А. Солохин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

$\Sigma^0$ -гиперон, состоящий из uds-кварков, детектируется по электромагнитному распаду на  $\Lambda$ -гиперон и фотон. Данный распад происходит с вероятностью почти 100% [1].

Малое время жизни  $\Sigma^0$ -частицы позволяет считать место столкновения протонных пучков точкой ее распада.  $\Lambda$ -гиперон восстанавливается по основному каналу распада на протон и пион. Фотон же можно восстанавливать двумя способами: методом фотонной конверсии в электрон-позитронную пару на материале вещества внутренней трековой системы эксперимента или в фотонном спектрометре.

Результатом данной работы является наблюдение пика инвариантной массы продуктов распада  $\Sigma^0$  двумя методами, упомянутыми выше. Также аналогичные пики были получены на основе моделирования методом Монте-Карло. Показано их согласие с результатами анализа реальных данных, что позволяет в дальнейшем получить спектр  $\Sigma^0$ -гиперона по поперечному импульсу и исследовать отношение спектров  $\Sigma^0$ -гиперона и  $\Lambda$ -гиперона.

### Литература

1. *Workman R. L.* [et al.]. The Review of Particle Physics (2022)// Prog. Theor. Exp. Phys. 2022. V. 2022(8): 083C01.

## Поиск распадов нейтральных пионов на три и четыре фотона в эксперименте NA62 (ЦЕРН)

*К. Ю. Горшанов*

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

Цель работы заключается в измерении чувствительности эксперимента NA62 [1] к поиску распадов  $\pi^0 \rightarrow 3\gamma$  и  $\pi^0 \rightarrow 4\gamma$ , используя накопленные за 2016–2018 гг. экспериментальные данные. Прямое наблюдение распада  $\pi^0 \rightarrow 3\gamma$  будет говорить о нарушении С-инвариантности в электромагнитных взаимодействиях, а также являться явным сигналом новой физики за пределами Стандартной модели. Распад  $\pi^0 \rightarrow 4\gamma$  является возможным фоном при поиске  $\pi^0 \rightarrow 3\gamma$  распада. Текущие ограничения на вероятности распадов были поставлены в эксперименте Crystal Box [2] в 1988 г.

Источником нейтральных пионов в данной работе выступают распады  $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^0$ . Были разработаны критерии отбора событий с тремя и четырьмя регистрируемыми продуктами после распада нейтрального пиона на установке эксперимента NA62. Детектор эксперимента и все физические процессы в нем моделируются методом Монте-Карло с помощью специализированного пакета Geant4. Использовались экспериментальные данные 2018 г. и моделирование Монте-Карло следующих цепочек распадов:

$$K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^0, \quad \pi^0 \rightarrow 2\gamma; \quad (1)$$

$$K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^0, \quad \pi^0 \rightarrow 3\gamma; \quad (2)$$

$$K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^0, \quad \pi^0 \rightarrow 4\gamma. \quad (3)$$

Получена чувствительность эксперимента к искомым распадам без учета фоновых событий. Она оказалась на один порядок лучше текущих ограничений. Был исследован основной источник фоновых событий — распады  $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$ . Оптимизированы критерии подавления фоновых событий для искомым распадов  $\pi^0 \rightarrow 3\gamma$  и  $\pi^0 \rightarrow 4\gamma$ .

При учете фоновых событий, а также применении критериев для их подавления чувствительность эксперимента NA62 снижается до уровня текущих ограничений.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-72-10096.

## Литература

1. Cortina Gil E. [et al.]. The Beam and detector of the NA62 experiment at CERN// JINST. 2017. V. 12(05). P05025.
2. McDonough J. [et al]. New searches for the C-noninvariant decay  $\pi^0 \rightarrow 3\gamma$  and the rare decay  $\pi^0 \rightarrow 4\gamma$  // Phys. Rev. D. 1988. V. 38. P. 2121–2128.

УДК 539.1

## Статус поиска темных фотонов в ближнем детекторе эксперимента T2K

А. С. Горин

Институт ядерных исследований РАН

Для поиска физики за рамками Стандартной модели рассмотрена модель «темного фотона», которая предполагает наличие дополнительной U(1)-симметрии, ответственной за частицы нового типа, которые взаимодействуют с частицами стандартной модели посредством «портальных» членов в лагранжиане. А именно, рассмотрен лагранжиан вида

$$L = L_{SM} - \frac{1}{4} F'^{\mu\nu} F'_{\mu\nu} + \frac{\varepsilon}{2} F^{\mu\nu} F'_{\mu\nu} + \frac{m_{\gamma'}^2}{2} A'_\mu A'^\mu, \quad (1)$$

где  $m_{\gamma'}$  — масса темного фотона,  $\varepsilon$  — константа смешивания.

Данный лагранжиан можно диагонализировать так, что феноменология обыкновенного фотона останется неизменной, а темный фотон получит смешивание с электромагнитным током.

В случае, когда полный относительный брэнчинг темного фотона в темный сектор близок к нулю, возможен поиск взаимодействий темного фотона с обычной материей. В работе рассмотрен этот случай. Темные фотоны экспериментально не обнаружены. На рис. 1 изображены актуальные ограничения на параметры темного фотона [1].

Брэнчинг рождения темного фотона в распадах нейтральных мезонов на древесном уровне задается формулой [2]

$$\text{Br}(\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma') = \text{Br}(\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma) 2\varepsilon^2 \left(1 - \frac{m_{\gamma'}^2}{m_{\pi^0}^2}\right)^3, \quad (2)$$

где  $m_{\pi^0}$  — масса мезона. Для распада темного фотона в лептонную пару

$$\text{Br}(\gamma' \rightarrow l^+l^-) = \frac{1}{3} \alpha \varepsilon^2 m_{\gamma'} \left(1 + \frac{2m_l^2}{m_{\gamma'}^2}\right) \sqrt{1 - \frac{4m_l^2}{m_{\gamma'}^2}}, \quad (3)$$

где  $\alpha$  — постоянная тонкой структуры,  $m_l$  — масса лептона. Брэнчинг распада в адроны связан с мюонным соотношением

$$\text{Br}(\gamma' \rightarrow \text{адр.}) = \text{Br}(\gamma' \rightarrow \mu^+\mu^-) R(s), \quad (4)$$

где  $R(s)$  — отношение адронного сечения реакции к мюонному.

Численные расчеты выполнены для темных фотонов, распадающихся во времяпроекционных камерах (TPC) детектора ND280 эксперимента T2K. Эксперимент T2K (Токай-то-Камиока) — нейтринный эксперимент с длинной базой, созданный для изучения нейтринных осцилляций. Пучок нейтрино создается на комплексе J-PARC (Japan Proton Accelerator Research Complex) в городе Токай, Япония и регистрируется в детекторе Супер-Камиоканде (SK). Ось эксперимента смещена на  $2,5^\circ$  от оси пучка, что позволяет получить лучший энергетический профиль нейтрино. Схема эксперимента представлена на рис. 2.

Ближний детектор ND280 (рис. 3) состоит из магнита, в который установлены несколько детекторов. Камеры TPC имеют размеры  $180 \times 200 \times 70$  см<sup>3</sup> и заполнены аргоном. В каждой камере используется 12 детекторов Micromegas, частицы идентифицируются по удельным ионизационным потерям.

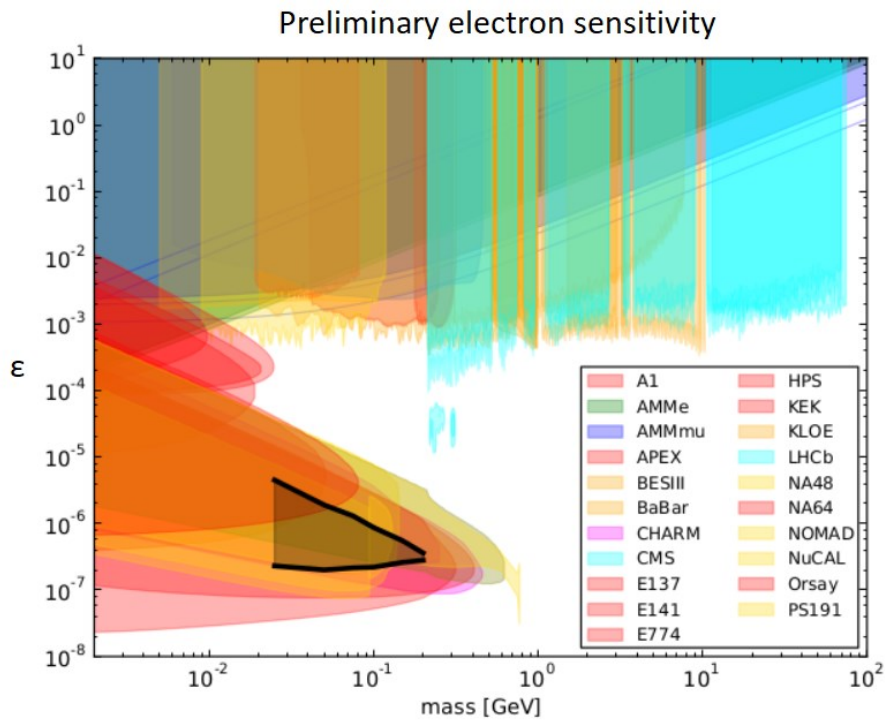


Рис. 1. Предварительная чувствительность к параметрам темного фотона в электронных распадах

Моделирование выполнено для темных фотонов, распадающихся в электроны и мюоны с массами  $25 \div 100$  МэВ в распадах  $\pi^0$  и  $100 \div 500$  МэВ в распадах  $\eta$ -мезонов. Также был смоделирован фон от нейтринных взаимодействий и выполнен анализ полученных событий.

В результате получены предварительные оценки чувствительности эксперимента к параметру смешивания темного фотона в данном диапазоне масс в предположении нулевого сигнала.

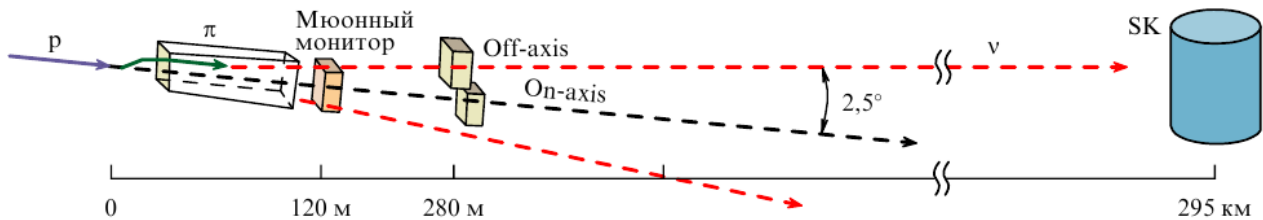


Рис. 2. Схема эксперимента T2K

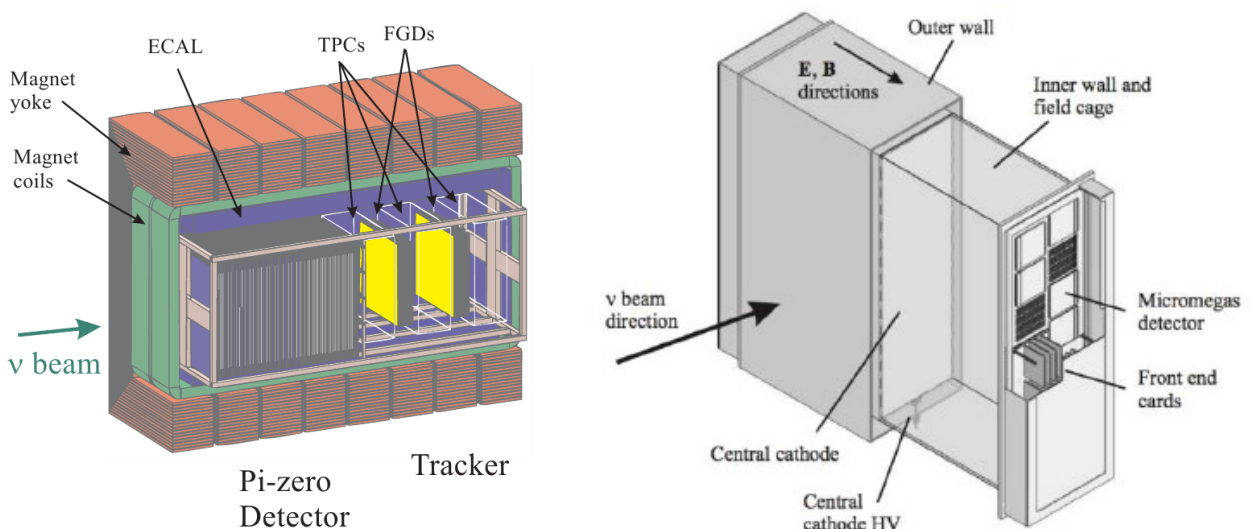


Рис. 3. Схема детектора ND280 (слева); схема TPC (справа)

## Литература

1. *Aaij R.* [et al.]. Search for  $A' \rightarrow \mu+\mu-$  Decays // *Phys. Rev. Lett.* 2020. V. 124: 041801.
2. *Gorbunov D., Makarov A., Timiryasov I.* Decaying light particles in the SHiP experiment: Signal rate estimates for hidden photons // *Phys. Rev. D.* 2015. V. 91: 035027.

УДК 539.1.074

### Уточнение калибровки DANSS с помощью остановившихся космических мюонов

*П. А. Горюцов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Физический институт РАН им. П. Н. Лебедева

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Детектор DANSS (Detector of Antineutrino based on Solid Scintillator) установлен на Калининской АЭС под ядром реактора. Одна из целей эксперимента DANSS — поиск осцилляций в гипотетическое стерильное состояние нейтрино. Для проведения такого рода исследований требуется высокая точность энергетической калибровки. Чувствительный объем детектора представляет из себя набор полос из сцинтиллятора (стрипов), сигналы с которых считываются с помощью SiPM и PMT. Стрипы лежат в двух проекциях: по 25 штук в одном слое и по 50 горизонтальных слоев. На каждый блок 5×10 стрипов (в каждой проекции) приходится один PMT. Итого 2500 SiPM и 50 PMT.

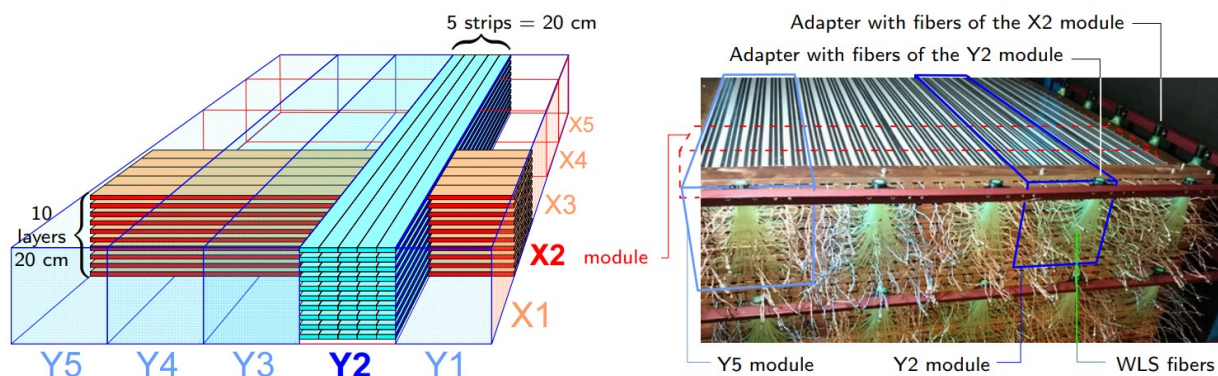


Рис. 1. Структура DANSS [1]

Относительная калибровка всех 2550 каналов производится с помощью восстановленных треков космических мюонов. Абсолютная энергетическая шкала фиксируется с помощью радиоактивных источников ( $^{22}\text{Na}$ ,  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{248}\text{Cm}$ ), бета-распадов  $^{12}\text{B}$  и распадов мюонов. Шкала, полученная таким образом, отличается от шкалы, полученной по космическим мюонам, на величину порядка 3,5%, что может говорить о неправильно заложенном в модель спектре космических мюонов.

В работе рассматривается калибровка с помощью остановившихся мюонов. По восстановленному треку мюона можно определить пройденное им в отдельном стрипе расстояние и получить величину потерь энергии  $dE/dx$ , а также восстановить энергетический спектр мюонов по пройденному расстоянию внутри чувствительной зоны детектора. Кроме того, остановившиеся мюоны, согласно формуле Бете–Блоха (1), выделяют в последних стрипах трека больше энергии:

$$\frac{-dE}{dx} = \frac{4\pi n_e z^2 e^4}{m_e v^2} \left[ \ln \left( \frac{2m_e v^2}{I} \right) - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2 - \delta - U \right]. \quad (1)$$

Это позволит исследовать энергетическую шкалу в большем диапазоне энергий, нежели дают радиоактивные источники. Резкий рост кривой Брэгга может позволить получить калибровку с более высокой точностью, по сравнению с мюонами, проходящими насквозь.

В работе описаны критерии отбора остановившихся космических мюонов, их обоснование, основанное на анализе детального моделирования пролета мюона через детектор. Получены кривые Брэгга (рис. 3), описывающие зависимость энергопотери от глубины проникновения в вещество, для экспери-



ментальных данных и для результатов моделирования. Проведено сравнение данных с детектора и данных, полученных с помощью моделирования. Получен оптимальный коэффициент калибровки.

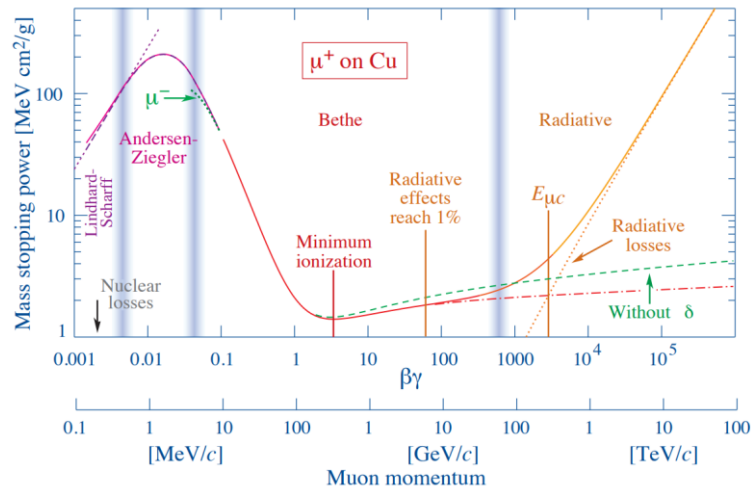


Рис. 2. Зависимость энергопотерь от импульса мюона [2]

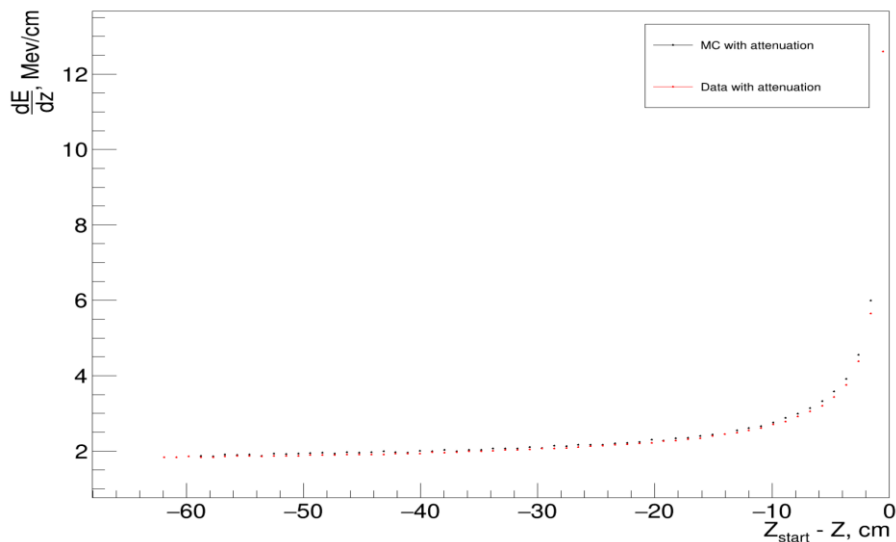


Рис. 3. Кривые Брэгга для данных и Монте-Карло

### Литература

1. *Alekseev I.* [et al.]. DANSS: Detector of the reactor AntiNeutrino based on Solid Scintillator // arXiv preprint. [2016]. arXiv: 1606.02896.
2. *Workman R. L.* [et al.]. Review of Particle Physics // Prog. Theor. Exp. Phys. 2022. V. 2022(8):083C01. DOI: 10.1093/ptep/ptac097.

УДК 53.01

### Влияние на обратную связь гидрометеоров в простейшем грозовом реакторе

*Д. И. Землянская*

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

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). Помимо таких характеристик системы, как напряженность электрического поля, плотность воздуха, размеры распространения области лавины, интересуют также и неоднородность пространства. Согласно предыдущим исследованиям, было выявлено, что на релятивистские лавины убегающих электронов в значительной степени влияют гидрометеоры — частицы льда, что хаотично расположены в облаке. По мере прохождения электронов и гамма-квантов через рассматриваемую область, частицы сталкиваются с гидрометеорами и в силу малых размеров ледяных вкраплений частицы лишь могут размножиться на них, потеряв лишь малую долю энергии. Так как данный процесс происходит в электрическом поле, то частицы набирают энергию за счет поля. После размножения на гидрометеорах поле может действовать сразу на две частицы, что и питает данную систему.

В данной работе изучен эффект от наличия гидрометеоров в модели простейшего грозового реактора. Простейший грозовой реактор — это модель, состоящая из двух ячеек с противоположно направленным электрическим полем, которая при подходящих параметрах может достигнуть бесконечной обратной связи между двумя частями, т. е. бесконечной работы с генерацией высокоэнергетических частиц. В связи с эффектом уменьшения длины нарастания лавины в системе с гидрометеорами, интересно исследовать и сделать более реалистичное приближение простейшего грозового реактора с наличием данных вкраплений. Этой задаче вопросам и посвящен данный доклад.

С целью обнаружения эффекта от наличия гидрометеоров была создана система из одной ячейки простейшего реактора с хаотичным распределением ледяных вкраплений внутри. На модели из одной ячейки было проведено исследование поэтапного развития формирования бесконечной обратной связи. Таким образом была выявлена зависимость между необходимыми параметрами системы для получения обратной связи между ячейками от плотности гидрометеоров в системе. Результаты получены в ходе моделирования лавинообразования с помощью библиотеки Geant4.

## Литература

1. Гуревич А. В., Зыбин К. П. Пробой на убегающих электронах и электрические разряды во время грозы // УФН. 2001. Т. 117. № 11. С. 1177–1198.
2. Dwyer J., Babich L. Low-energy electron production by relativistic runaway electron avalanches in air // J. Geophys. Res. 2011. V. 116: A09301.
3. Allison J. [et al.]. Recent developments in GEANT4 // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A. 2016. V. 835. P. 186–225.
4. Zemlianskaya D., Stadnichuk E., Svechnikova E. Influence of hydrometeors on relativistic runaway electron avalanches // arXiv preprint. [2022]. arXiv: 2210.01916.
5. Stadnichuk E. Simple reactor model of relativistic runaway electron avalanche development // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2301.00542.

УДК 539.1.074.3

## Текущий статус 3D-сегментированного детектора нейтрино SuperFGD для эксперимента T2K

А. Е. Дергачева<sup>1</sup>, Г. С. Ерофеев<sup>1,2</sup>, Н. В. Ершов<sup>1</sup>, Д. В. Федорова<sup>1,3</sup>, С. А. Федотов<sup>1</sup>, Ю. Г. Куденко<sup>1</sup>, А. В. Мефодьев<sup>1</sup>, О. В. Минеев<sup>1</sup>, М. М. Хабибуллин<sup>1</sup>, А. Н. Хотянцев<sup>1</sup>, А. А. Чвирова<sup>1,2</sup>, Д. О. Чернов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт ядерных исследований РАН (ИЯИ РАН)

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

<sup>3</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

T2K (Tokai to Kamioka) — это первый нейтринный эксперимент с длинной базой второго поколения, основной идеей которого является концепция внеосевого пучка нейтрино, генерируемого протонным синхротроном (PS) мощностью 30 ГэВ на базе исследовательского комплекса J-PARC в Японии.

Проект нацелен на поиск нового источника нарушения зарядово-пространственной CP-четности в нейтринном секторе — одного из необходимых элементов для объяснения физических явлений за пределами Стандартной модели, а именно, барионной асимметрии Вселенной и лептогенеза.

В настоящее время эксперимент T2K исключает CP-сохранение ( $\delta_{CP} = 0, \pi$ ) на уровне 90% CL [1]. Чтобы повысить чувствительность эксперимента к CP-нарушению, необходимо снизить систематические неопределенности в прогнозировании количества событий на дальнем черенковском детекторе Super-Kamiokande до 3–4% с текущего уровня в 6–7%. В связи с этим была запущена интенсивная программа

модернизации внеосевого ближнего детектора ND280 [2], в рамках которой был предложен и спроектирован новый полностью активный 3D сегментированный сцинтилляционный детектор нейтрино SuperFGD.

Общий вес детектора SuperFGD составляет около двух тонн, он состоит из двух миллионов оптически изолированных кубиков со стороной 1 см и с тремя взаимноортогональными отверстиями, предназначенными для вставки спектросмещающих волокон (всего ~ 60 000 каналов для считывания сигнала).

Все 56 слоев детектора SuperFGD и платформа для его сборки были переправлены в Японию в июне 2022 г. Сборка детектора SuperFGD началась в октябре 2022 г. на базе J-PARC. На данный момент окончена процедура вставки спектросмещающих волокон вместо лесок, на которых был изначально собран детектор.

В докладе будет представлено обсуждение следующих важных аспектов касательно детектора SuperFGD, таких как электроника и механика SFGD, тестирование и контроль качества MPPC64-PSB, система калибровки спектросмещающих волокон и LEDs, а также DAQ SFGD.

Более подробная информация о текущем статусе SuperFGD и предстоящих планах в рамках программы модернизации ближнего детектора ND280 эксперимента T2K будет обсуждаться в докладе конференции.

### Литература

1. *Abe K.* [et al.]. Constraint on the matter-antimatter symmetry-violating phase in neutrino oscillations // *Nature*. 2020. V. 580. P. 339–344.
2. *Abe K.* [et al.]. T2K ND280 Upgrade — Technical Design Report // arXiv preprint. [2019]. arXiv: 1901.03750.

УДК 539.120.8

### Два метода модельного анализа корреляций поперечного импульса и множественности в диапазоне энергий NICA и SPS

*А. П. Звягина, Е. В. Андронов*

Санкт-Петербургский государственный университет

Исследование корреляции между множественностью заряженных частиц и средним поперечным импульсом проводились в протон-протонных столкновениях от энергии SPS до энергий LHC [1]. Расширение экспериментальных данных от отрицательных корреляций при энергиях  $\sqrt{s} = 17 \div 40$  ГэВ в область более низких энергий может дать значительные ограничения для различных теоретических моделей. Ранее в моделях SMASH, EPOS, UrQMD и PHSD были получены нетривиальные зависимости сильно интенсивных переменных от энергии столкновения, а именно, для  $\Delta[pt, N]$  [2] и  $\langle N \rangle D[pt, N]$  [3]. Также в анализ было включено исследование кумулянтов второго и третьего порядка для поперечного импульса. Их зависимости от энергии отклоняются от модели независимых источников, что подтверждается экспериментальными данными, полученными в результате столкновения Au+Au при энергии 200 МэВ [4]. В модели SMASH как для сильно интенсивных переменных, так и для кумулянтов, возникает определенная «волна», которая может стать доказательством перехода от резонанса к строкам. В данной работе предлагаются два метода исследования для сильно интенсивных переменных и кумулянтов: прямой метод исследования корреляций и метод подсобытий. Прямой метод исследования уже проводился раньше: в данном методе исследование ведется по всему интервалу псевдобыстроты. В методе подсобытий предполагается провести анализ сильно интенсивных переменных и кумулянтов второго и третьего порядка в двух различных промежутках по псевдобыстроте, а также их зависимость при изменении расстояния между этими двумя интервалами, что позволит нам оценить вклад ближних корреляций. Будет представлено сравнение этих двух методов для всех четырех моделей: SMASH [5], EPOS [6], UrQMD [7] и PHSD [8].

### Литература

1. *Armesto N., Derkach D. A., Feofilov G. A.* p(t)-multiplicity correlations in a multi-Pomeron-exchange model with string collective effects // *Phys. Atom. Nucl.* 2008. V. 71(12). P. 2087–2095.
2. *Gorenstein M. I., Gaździcki M.* Strongly intensive quantities // *Phys. Rev. C*. 2011. V. 84(1):014904.
3. *Wang X.-N., Gyulassy M.* HIJING: A Monte Carlo model for multiple jet production in pp pA and collisions // *Phys. Rev. D*. 1992. V. 44(11). P. 3501–3516.

4. *Cody M., Gavin S.* [et. al.]. Complementary Two-Particle Correlation Observables for Relativistic Nuclear Collisions // *Phys. Rev. C*. 2023. V. 107: 014909.
5. *Weil J., Steinberg V.* [et. al.] Particle production and equilibrium properties within a new hadron transport approach for heavy-ion collisions // *Phys. Rev. C*. 2016. V. 94: 054905.
6. *Pierog T., Karpenko I.* [et. al.] EPOS LHC: Test of collective hadronization with data measured at the CERN large hadron collider // *Phys. Rev. C*. 2015. V. 92: 034906.
7. *Bleicher M., Zabrodin E.* [et. al.]. Relativistic hadron-hadron collisions in the ultra-relativistic quantum molecular dynamics model // *J. Phys. G*. 1999. V. 25(9): 1859.
8. *Bratkovskaya E., Cassing W.* [et. al.]. Parton-hadron-string dynamics at relativistic collider energies // *Nucl. Phys. A*. 2011. V. 856(1). P. 162–182.

УДК 539.1.074

## Исследование временного разрешения прототипа времяпролетного нейтронного детектора в эксперименте BM@N на пучке Xe с энергией 3,8 АГэВ

*А. А. Зубанков<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Институт ядерных исследований РАН

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

Прототип времяпролетного нейтронного детектора nDet был впервые использован в тяжелоионном сеансе эксперимента BM@N (Baryonic Matter at Nuclotron) [1]. BM@N является первым действующим экспериментом на ускорительном комплексе NICA и направлен на исследование КХД-диаграммы при больших барионных плотностях, в частности, на изучение образования (мульти) странных гиперонов и поиск гиперядер в ядро-ядерных столкновениях при энергиях ионов пучка до 4,5 АГэВ, изучение азимутальной асимметрии выходов заряженных частиц в столкновениях тяжелых ядер. Нейтронный детектор позволяет идентифицировать и измерять энергии нейтронов, образующихся в ядро-ядерных столкновениях.

Прототип нейтронного детектора (рис. 1) состоит из 15 слоев: первый слой без поглотителя используется как вето, 5 слоев со свинцовым поглотителем толщиной 8 мм и 9 слоев с медным поглотителем толщиной 30 мм. Каждый слой состоит из 9 сцинтилляционных ячеек  $40 \times 40 \times 25$  мм<sup>3</sup> со считывающей электроникой. Время и амплитуда считываются модулями время-цифрового преобразователя TQDC.

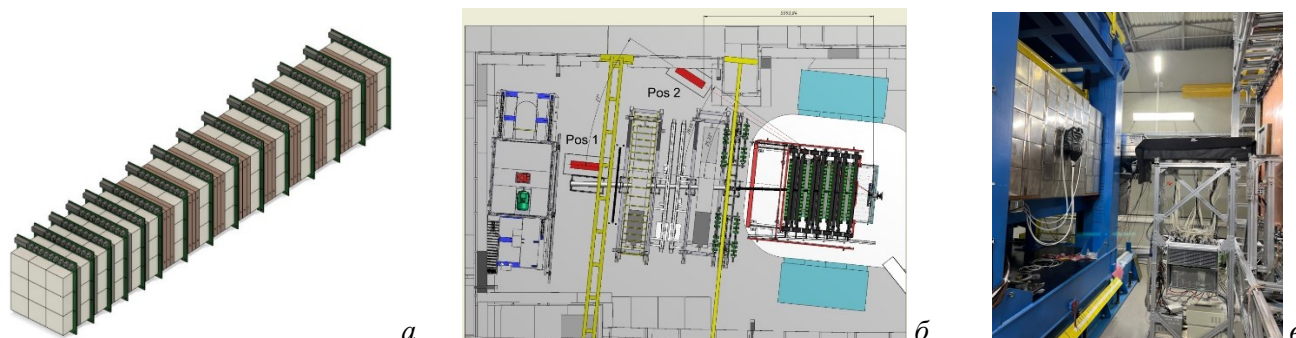


Рис. 1. Схематичное изображение прототипа нейтронного детектора (а), его положения в 8 сеансе BM@N под 0° и 27° к пучку (б), фотография nDet под 0° к пучку (в)

Система онлайн-мониторинга прототипа нейтронного детектора была впервые создана и использована в Хе-сеансе с целью контроля качества набираемых данных и отслеживания работы в реальном времени. Регулярно в реальном времени заполняется ряд гистограмм, отображающих собранный сигнал с детектора, и передается на веб-сервер <https://bmn-mon.jinr.ru/>. Система онлайн-мониторинга включает в себя отслеживание сигнала в каждом канале, профили ливней в ячейках, временные и амплитудные распределения в каналах. Указанные средства мониторинга позволили в реальном времени отслеживать как состояние nDet, так и качество собираемых данных с помощью реализованной возможности сравнения с данными предыдущих рангов и моделированием на тех же гистограммах.

По собранным во время сеанса данным проведен анализ временного разрешения детектора. Время определялось как разница между измеренным временем частицы в детекторе и временем стартового триггера. Для калибровки детектора использовались данные, когда детектор находился под 0° к пучку

ускоренных ионов ксенона. Время-амплитудная коррекция сигналов позволила избавиться от зависимости времени от амплитуды сигналов, что улучшило временное разрешение в 2,4 раза.

Поскольку нейтроны имеют разброс по скоростям, более точную оценку временного разрешения можно провести по событиям с прилетевшими в nDet гамма-квантами. Для этого был проведен анализ событий, попавших в центральную ячейку, с отбором, включающим в себя отсутствие сигнала в вето-слое, чтобы отсеять заряженные частицы и одновременное наличие сигналов амплитудой больше 0,5 МIP во 2, 3 и 4 слоях. Такой отбор позволяет отделить события с гамма-квантами на достаточном числе радиационных длин —  $4,52 X_0$ . Видно (рис. 2), что число событий взаимодействия гамма-квантов с веществом детектора мало по отношению к общему числу событий и профиль резко падает после 4 слоя.

Проведено исследование временного разрешения после отбора событий взаимодействия вещества детектора с гамма-квантами. Временное разрешение оценено как  $\sigma/\sqrt{2}$  распределения разницы по времени между ячейками из соседних слоев (рис. 3). Временное разрешение для центральных ячеек до отбора в среднем составило  $241 \pm 8$  пс, после отбора —  $217 \pm 14$  пс. Отбор позволил улучшить временное разрешение на  $\sim 10\%$ , что подтверждает достоверность отбора из-за отсутствия у гамма-квантов разброса по скоростям по сравнению с нейтронами.

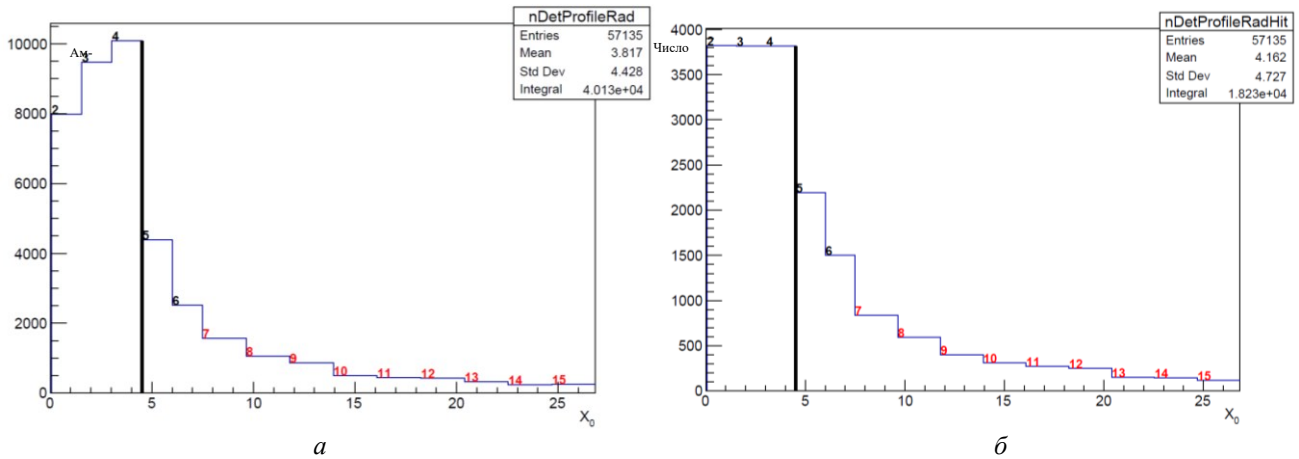


Рис. 2. Профили выделенной энергии в МIP (а) и числа событий (б) для центральной ячейки nDet в положении  $0^\circ$  к пучку с учетом отбора событий взаимодействия вещества детектора с гамма-квантами (цифрами указаны порядковые номера слоев: черные — свинцовый поглотитель, красные — медный)

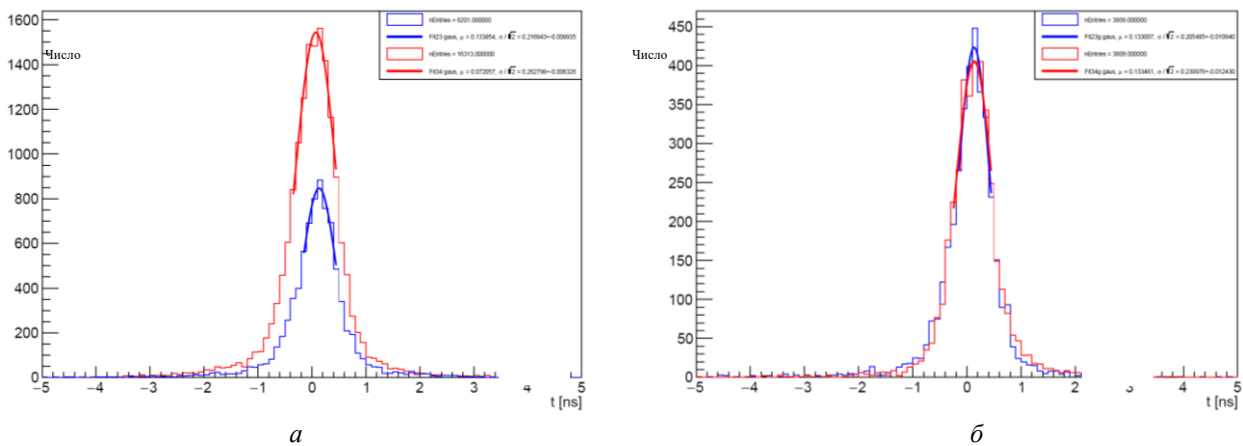


Рис. 3. Распределение разниц времен: красным — между 2 и 3 слоями, синим — между 3 и 4, до (а) и после (б) отбора

## Литература

1. *Kapishin M.* Studies of baryonic matter in the BM@N and MPD experiments at Nuclotron/NICA // PoS, 2019. PoS(CORFU2018)188.

## Изучение возможных фоновых процессов для поиска тяжелого нейтрино в распаде $D_s^+ \rightarrow \mu^+ N \rightarrow \mu^+ \mu^+ \pi^-$

*Я. А. Андреев<sup>1</sup>, А. С. Седельников<sup>1</sup>, К. М. Иванов<sup>1</sup>, Р. Н. Чистов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Стандартная модель (СМ) физики элементарных частиц представляет собой красивую и завершенную теорию, хотя в настоящий момент достаточно очевидно, что она не может являться полной теорией всего. Так, она не описывает темную материю и барионную асимметрию во Вселенной, осцилляции и ненулевые массы нейтрино и другие явления. Одним из возможных решений [1, 2] является расширение СМ введением тяжелых нейтральных лептонов (стерильных нейтрино)  $N$ , которые, в отличие от флейворных нейтрино СМ, не взаимодействуют с веществом, а могут лишь осциллировать в другие типы нейтрино.

Мы считаем, что поиск таких частиц  $N$  возможен и в распадах тяжелых адронов в эксперименте CMS на Большом адронном коллайдере (ЦЕРН, Женева), в частности — в лептонном распаде  $D_s^+$  мезона на  $\mu^+ \nu_\mu$ , где мюонное нейтрино осциллирует в  $N$  с последующим распадом на  $\mu^+ \pi^-$ . Так, в частности, ранее мы уже провели работу по изучению возможных источников  $D_s^+$  в условиях детектора CMS. Нами было установлено, что с использованием специального набора данных VParking, записанного в 2018 г. и обогащенного полулептонными распадами тяжелых адронов, можно восстановить более 1,7 миллиона сигнальных событий  $B_s^0 \rightarrow D_s^+ \mu^- \bar{\nu}_\mu$ , где  $D_s^+ \rightarrow \phi \pi^+ \rightarrow K^+ K^- \pi^+$  [3]. С учетом брэнчингов (относительных вероятностей) вышеуказанных распадов, суммарное число потенциальных  $D_s^+$  кандидатов в наборе данных VParking достигает порядка  $10^8$  событий, что позволяет надеяться на перспективность поисков редких и запрещенных распадов  $D_s^+$ .

Однако помимо изучения непосредственно сигнального распада  $D_s^+ \rightarrow \mu^+ N \rightarrow \mu^+ \mu^+ \pi^-$ , важным является также вопрос изучения фоновых процессов, которые могут давать вклад в область искомого сигнала. Во многом такие фоны связаны с возможной мис-идентификацией заряженных адронных треков и мюонов. Так, например, одним из потенциально наиболее значимых фонов является распад  $D_s^+ \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^+$ , где два пионных трека могут быть взяты как мюоны.

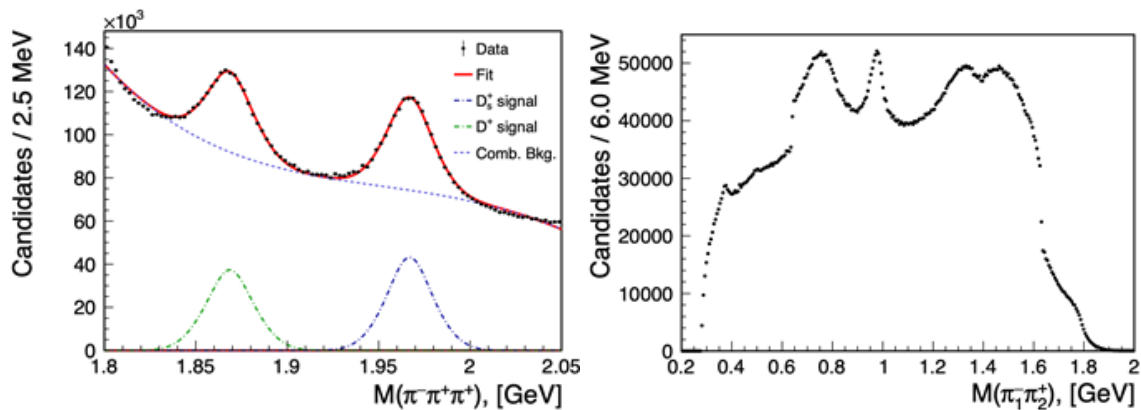


Рис. 1. Полученные на данных VParking распределения по инвариантной массе  $\pi^+ \pi^+ \pi^-$  с сигналами  $D^+$  и  $D_s^+$ -мезонов (слева), а также инвариантной массы  $\pi^+ \pi^-$ -мезонов (справа), где в наличии структуры от  $\rho(770)^0$ ,  $f_0(980)$ ,  $f_0(1370)$  и  $\rho(1450)^0$  резонансов.

На рис. 1 представлены наши результаты по изучению распада  $D_s^+ \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^+$  на данных VParking (набраны экспериментом CMS в 2018 г.). В результате аппроксимации распределения слева двойной функцией Гаусса с общим средним для сигналов и полиномом 4 степени для фона получено  $N_{D^+} = (488,5 \pm 2,2) \cdot 10^3$  сигнальных событий  $D^+$ -мезона и  $N_{D_s^+} = (553,9 \pm 2,0) \cdot 10^3$  — для  $D_s^+$ . Справа также явно представлена богатая резонансная структура в системе  $\pi^+ \pi^-$ , что представляет особый интерес для поиска тяжелого нейтрино с малым отлетом от вершины распада  $D_s^+$ . Все вышесказанное обосновывает актуальность изучения этого распада как важного источника возможного фона в сигнальном конечном состоянии.

Помимо этого, не менее важными источниками фоновых процессов, особенно для значимо отлетающих нейтрино, являются распады с присутствием так называемых  $V0$ -частиц (нейтрально-заряженных долгоживущих частиц, которые далеко отлетают и распадаются на два трека противоположных зарядов), таких как  $K_S^0 \rightarrow \pi^+ \pi^-$  и  $\Lambda \rightarrow p \pi^-$ . Так, в частности, мы изучаем такие процессы и их возможный вклад в наш сигнал, как:  $\Lambda_c^+ \rightarrow \Lambda \pi^+$ ,  $\Lambda \rightarrow p \pi^-$  и  $\Lambda_c^+ \rightarrow K_S^0 p$ ,  $K_S^0 \rightarrow \pi^+ \pi^-$  (где треки протона и  $\pi^+$  перепутаны с мюонами),  $D_s^+ \rightarrow K_S^0 \pi^+$ ,  $K_S^0 \rightarrow \pi^+ \pi^-$  (два положительных пиона перепутаны с мюонами),  $\Lambda_c^+ \rightarrow \Lambda \mu^+ \nu_\mu$ ,  $\Lambda \rightarrow p \pi^-$  (протон перепутан с мюоном).

Изучение вышеперечисленных фоновых процессов и определение их возможных вкладов в сигнальное конечное состояние  $\mu^+ N \rightarrow \mu^+ \mu^+ \pi^-$  является неотъемлемой частью исследования поиска тяжелого стерильного нейтрино на данных эксперимента CMS и существенно продвигает наше понимание о свойствах такого рода процессов.

Исследование было выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 22-22-00401.

### Литература

1. *Asaka T., Blanchet S., Shaposhnikov M.* The  $\nu$ MSM, dark matter and neutrino masses // *Phys. Lett. B.* 2005. V. 631. P. 151–156. DOI: 10.1016/j.physletb.2005.09.070.
2. *Asaka T., Shaposhnikov M.* Phys. The  $\nu$ MSM, dark matter and baryon asymmetry of the universe // *Lett. B.* 2005. V. 620. P. 17–26. DOI: 10.1016/j.physletb.2005.06.020.
3. *Андреев Я. А., Иванов К. М., Чистов Р. Н.* Изучение источников  $D_s^+$ -мезонов на данных эксперимента cms // *Краткие сообщения по физике ФИАН.* 2003. Т. 50. № 1. С. 42–28.

УДК: 539.123.6

## Новые спектры антинейтрино $^{235}\text{U}$ , $^{238}\text{U}$ , $^{239}\text{Pu}$ и $^{241}\text{Pu}$ , полученные из эксперимента Double Chooz

*А. П. Власенко<sup>1,2</sup>, С. В. Ингерман<sup>1</sup>, П. Ю. Наумов<sup>2</sup>, В. В. Синева<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Институт ядерных исследований Российской академии наук

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

В эксперименте Double Chooz на ближнем детекторе была набрана большая статистика нейтринных событий от реакции обратного бета-распада (ОБР) [1] на протоне. В ИЯИ РАН разработана методика перевода очищенного от фонов спектра позитронов реакции ОБР в спектр антинейтрино. Получен спектр антинейтрино ядерного реактора при среднем составе активной зоны  $^{235}\text{U}$  — 0,52,  $^{238}\text{U}$  — 0,087,  $^{239}\text{Pu}$  — 0,333,  $^{241}\text{Pu}$  — 0,06. Затем из реакторного спектра были выделены спектры антинейтрино отдельных изотопов ядерного топлива  $^{235}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$ ,  $^{239}\text{Pu}$  и  $^{241}\text{Pu}$  [2]. Эти спектры компонентов ядерного топлива можно считать полученными экспериментально. Чтобы согласовать расчетные спектры антинейтрино с экспериментальными, было выполнено фитирование экспериментальных спектров расчетными с использованием силовой функции, которая позволяла варьировать форму индивидуальных спектров осколков.

Таким образом, были получены расчетные спектры антинейтрино, соответствующие экспериментальным спектрам. Рассчитанные сечения [3] для расчетных спектров, сложенные с весами активной зоны, совпадают с сечениями, полученными в коллаборациях Double Chooz [4] и Бюже-4 [5] в пределах их экспериментальных ошибок. Небольшое систематическое уменьшение расчетного сечения объясняется наличием в экспериментальном спектре дополнительного источника антинейтрино от бассейна с отработанным топливом.

### Литература

1. *Cowan C. L. Jr.* [et al.]. Detection of the Free Neutrino: a Confirmation. *Science.* 1956. V. 124. P. 103–104.
2. *Sinev V. V.* Experimental spectrum of reactor antineutrinos and spectra of main fissile isotopes // *Phys. At. Nuc.* 2013. V. 76. P. 537–543.
3. *Strumia A., Vissani F.* Precise quasielastic neutrino/nucleon cross section // *Phys. Lett. B.* 2003. V. 564(1–2). P. 42–54.
4. *De Kerret H.* [et al.]. Double Chooz  $\theta_{13}$  measurement via total neutron capture detection // *Nature Physics.* 2020. V. 16. P. 558–564.
5. *Declais Y.* [et al.]. Study of reactor antineutrino interaction with proton at Bugey nuclear power plant // *Phys. Lett. B.* 1994. V. 338. P. 383–389.

## Магнитооптическая структура отводных каналов BuPass в синхротроне NICA для поиска ЭДМ в режиме накопительного кольца

*С. Колокольчиков, Ю. Сеничев*

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

Ускорительный комплекс NICA в г. Дубна был спроектирован для экспериментов с тяжелыми ионами, а также поляризованными протонами на энергию порядка 13 ГэВ. В этой же машине возможно также и ускорение дейтронов до энергии порядка 240 МэВ для проведения эксперимента по поиску ЭДМ. Однако требуется модернизация магнитооптической структуры прямых участков, как показано на рис. 1, поскольку для обеспечения режима квазимороженного спина применяются E+V элементы, именуемые Wien Filters. Такие элементы могут быть расположены на прямом участке и компенсируют поворот спина от поворотной арки, при этом не искажая динамику пучка. Для измерения ЭДМ NICA должна использоваться в режиме накопительного кольца, а не коллайдерной. Таким требованием удовлетворяет установка дополнительных отводных каналов BuPass. Полученная регулярная структура на альтернативных прямых участках, параллельным исходным, даст возможность одновременно использовать комплекс NICA в различных экспериментах.

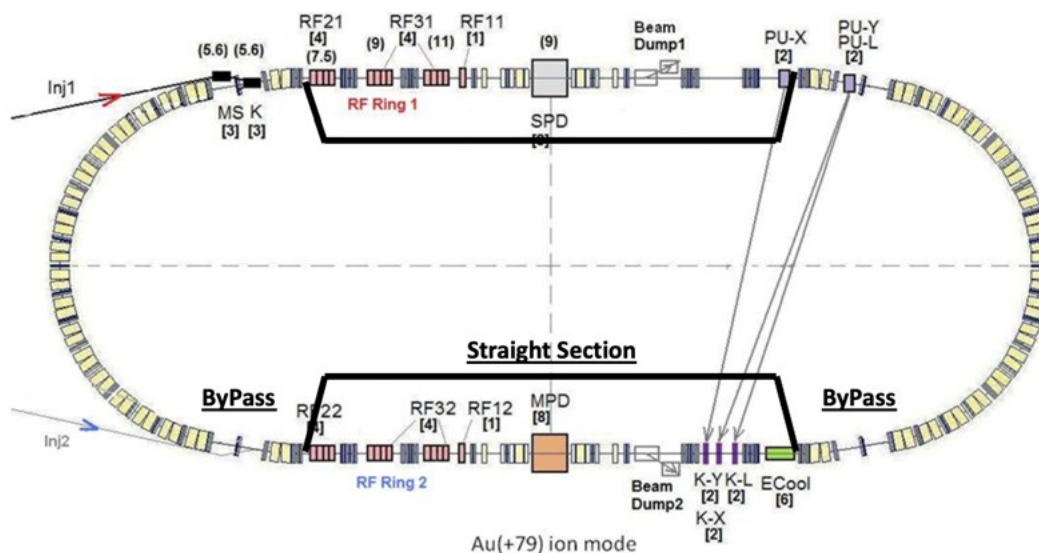


Рис. 4. Принципиальная схема кольца NICA с принципиальной схемой альтернативных каналов BuPass

### Литература

1. *Senichev Y., Aksentyev A., Kolokolchikov S.* [et al.]. Quasi-frozen spin concept of magneto-optical structure of NICA adapted to study the electric dipole moment of the deuteron and to search for the axion // *J. Phys. Conf. Ser.* 2023. V. 2420: 012052, DOI: 10.1088/1742-6596/2420/1/012052.

## Рассмотрение адаптированной структуры Nuclotron для поиска EDM

*С. Колокольчиков, Ю. Сеничев*

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

В настоящее время рассматривается возможность модернизации магнитооптической структуры Нуклотрона в ОИЯИ г. Дубна в связи с ревизией всех функций отдельных частей сооружаемого ускорительного комплекса НИКА. В этой работе мы рассмотрели магнитооптическую структуру Нуклотрона, адаптированную для поиска электрического дипольного момента дейтрона (dEDM).



Необходимо было решить четыре проблемы: реализация концепции «квазизамороженный спин» в предлагаемой оптике, увеличение длин межарочных прямых промежутков, нулевая дисперсия на прямых участках, сохранение длины кольца ускорителя с учетом размещения требуемого оборудования. Решение первой проблемы реализует основополагающую часть всей задачи — регистрацию сигнала dEDM. С этой целью в структуру вводятся дополнительные электростатические deflectоры с отрицательной кривизной, что позволяет в интеграле сохранять направление спина вдоль импульса во всем кольце в рамках концепции «квазизамороженный спин». Одновременно решается четвертая проблема — сохранение места для существующего оборудования. Вторая проблема — увеличение прямых участков до требуемой длины — разрешается за счет увеличения максимального магнитного поля в поворотных магнитах до величины 1,8 Тл.

Третья проблема снимается выбором набега фазы радиальных колебаний.

В итоге мы можем потенциально рассматривать возможность исследования ЭДМ на Нуклотроне.

### Литература

1. *Senichev Y., Aksentyev A., Kolokolchikov S.* [et al.]. Quasi-frozen spin concept of magneto-optical structure of NICA adapted to study the electric dipole moment of the deuteron and to search for the axion // *J. Phys. Conf. Ser.* 2023. V. 2420: 012052, DOI: 10.1088/1742-6596/2420/1/012052.

УДК 539.1.074.3

### Детектор частиц на основе сцинтиллирующих сред с сильным рассеянием

*А. Л. Крапива<sup>1</sup>, Д. Н. Свирида<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

В работе рассматриваются свойства детектора частиц на основе органического сцинтиллятора в виде гранул [1]. При засыпке таких гранул диаметром 3 мм и толщиной 1 мм проходящий сквозь объем свет будет отражаться от них и рассеиваться. Это позволяет «локализовать» существенную часть испущенных сцинтиллятором фотонов в некотором радиусе. Объем, засыпанный такими гранулами, в нашем рассмотрении можно приблизить однородной средой, характеризующейся длинами рассеяния и поглощения, в свою очередь, зависящих от материала и формы гранул. Для моделирования используется метод Монте-Карло, реализованный на языке Python. В ходе расчетов были получены зависимости, показанные на рис. 1.

Для проверки данной идеи была собрана экспериментальная установка, приведенная на рис. 2. Упрощенная модель без электроники показана на рис. 3. Установка состоит из чувствительного объема 88×88×111 мм, засыпанного сцинтиллирующими гранулами. Объем пронизан 16 параллельными спектросмещающими волокнами (файберами), расположенными сеткой 4×4 с шагом 15 мм. Волокна служат для сбора испущенного света. С одного конца к волокнам присоединены кремниевые фотоумножители (КФУ), а с другого они окрашены черной краской. За счет точно известных параметров плат, на которых распаяны КФУ, соединение и центровка волокон с КФУ обеспечиваются коннекторами, в которые вклеены волокна, и переходниками, центрующими платы посредством отверстий и болтов. Считывание данных осуществляется при помощи 64-канального модуля UWFD64 оцифровки формы сигналов, расположенного в крейте VME. Контроль напряжения питания КФУ выполняют специально разработанные платы, управляемые по последовательному интерфейсу RS232. Эта система аналогична используемой в эксперименте DANSS [2, 3]. Внешним триггером для калибровки служат сцинтилляционные пластины (стрипы), включенные в схему совпадений: сверху и снизу по паре стрипов, идущих вдоль волокон, и паре поперечных стрипов.

Распределения сигналов от космических мюонов, полученные на данной установке, показаны на рис. 5 (без триггеров). Был выработан алгоритм динамической абсолютной калибровки каждого КФУ по шумовым спектрам для перевода получаемого сигнала из единиц АЦП в фотоэлектроны. Также по набранным спектрам была проведена относительная калибровка каналов «волокно+КФУ» друг между другом для компенсации разницы в световом контакте.

В ближайшее время будет закончено получение функции сигнала в волокне от расстояния до трека частицы, посредством изучения спектра и функции асимметрии отклика детектора на космическое излучение.

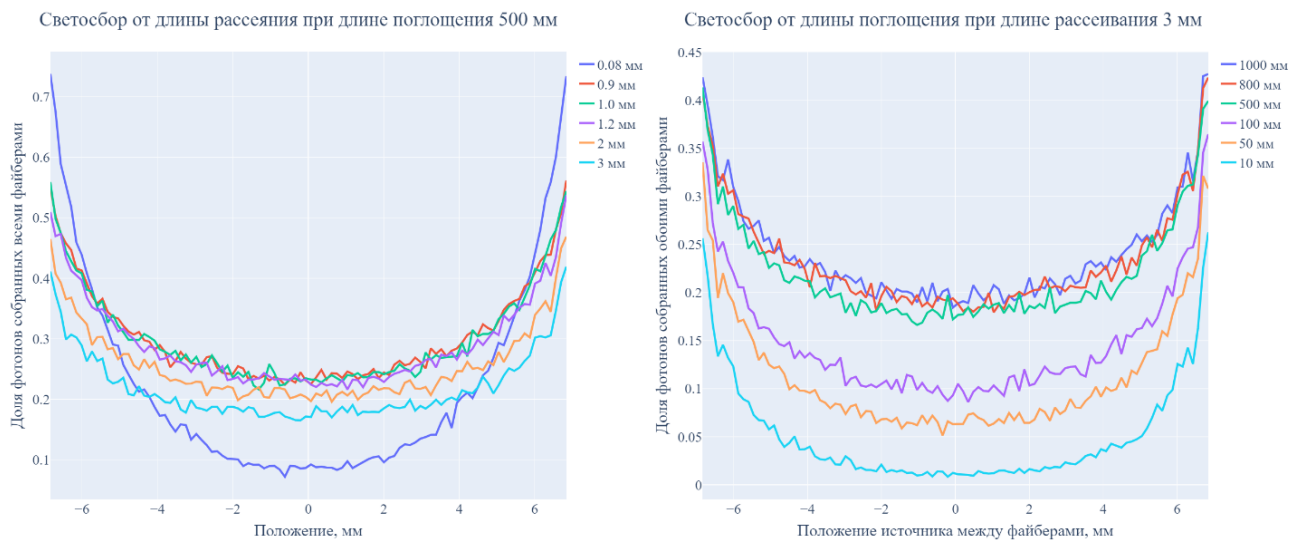


Рис. 1. Варьирование параметров среды при перемещении точки излучения фотонов между двух собирающих свет волокон в их плоскости

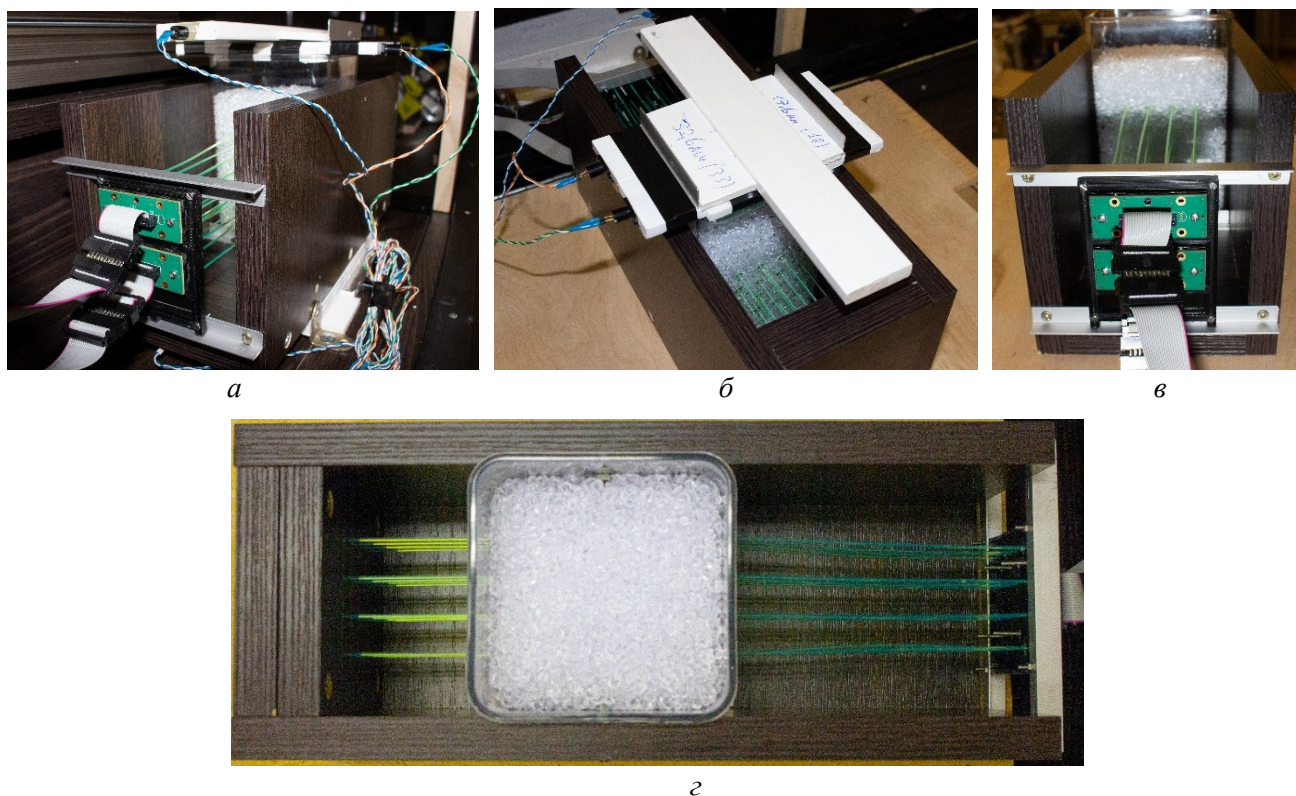


Рис. 2. Фотографии установки: б—сверху с триггерной системой, в—со стороны КФУ: г—сверху без триггерной системы

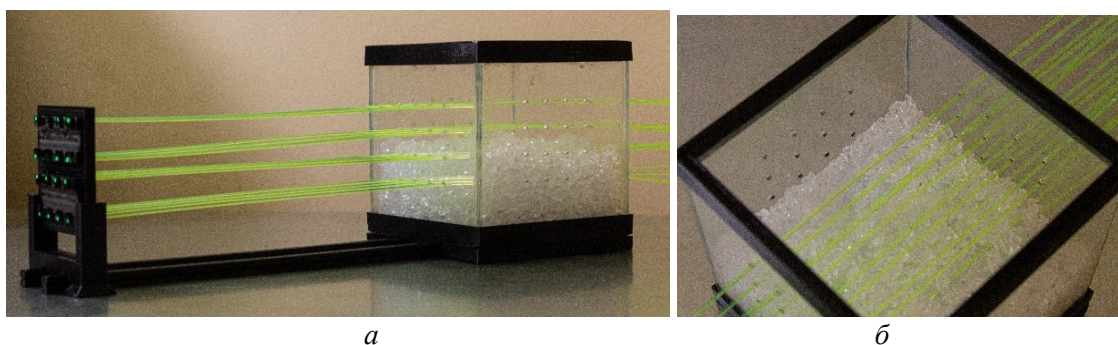


Рис. 3. Упрощенная модель: а—сбоку; б—внутри чувствительного объема

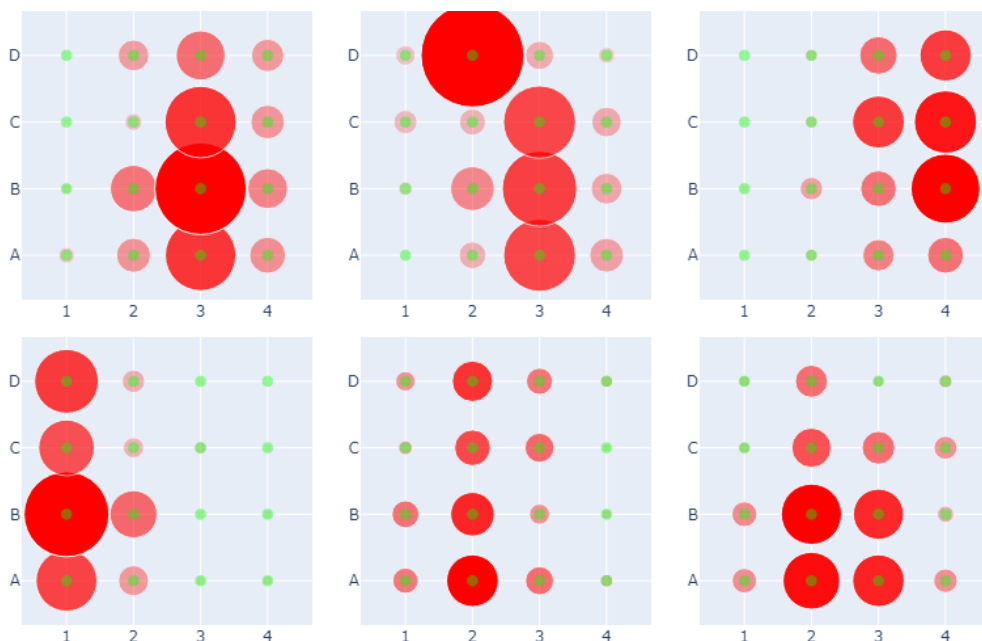


Рис. 5. Типичные распределения сигналов в каналах (вид со стороны КФУ), диаметр круга отражает абсолютную величину сигнала, прозрачность ранжирует сигналы каналов внутри события (чем прозрачнее, тем слабее)

В дальнейшем планируется изучить, как изменятся параметры установки, если средой будет выступать смесь воды или жидкого сцинтиллятора с гранулами, и сравнить это с прозрачным жидким сцинтиллятором.

### Литература

1. *Brekhovskikh V., Gorin A., Dyatchenko V.* [et al.]. New Generation of Large Scale Scintillation Counters for Detection of EAS and Use in Guard Systems of Experimental Physics Setups // *Phys. At. Nucl.* 2019. V. 82. С. 649–656.
2. *Alekseev I.* [et al.]. Optimized scintillation strip design for the DANSS upgrade // *JINST.* 2022. V. 17(4): 04009.
3. *Svirida D.* Electronics of the data acquisition system of the DANSS detector based on silicon photomultipliers // *Phys. Part. Nucl.* 2018. V. 49(2018) P. 84–85.

УДК 539.123

## Использование нейронных сетей для реконструкции углов прилета частиц в нейтринном телескопе Baikal-GVD

*А. Ю. Леонов*

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

Целью работы является создание нейронных сетей для задачи реконструкции углов прилета атмосферных нейтрино в эксперименте Baikal-GVD. Целью Baikal-GVD является исследование событий, связанных с астрофизическими нейтрино с энергиями порядка ТэВ–ПэВ с чувствительностью, сравнимой с экспериментами IceCube и KM3NeT-ARCA. Телескоп состоит из 10 кластеров, каждый из которых представляет собой 8 струн в виде правильного 7-угольника с центром. На каждой струне равномерно размещено по 36 оптических модулей, фиксирующих черенковское излучение частиц, возникающих при взаимодействии нейтрино с водой (рис. 1). Телескоп фиксирует атмосферные мюоны и нейтрино, а также астрофизические нейтрино. Для отделения нейтринных случаев от мюонных рассматриваются события только из-под Земли.

Задача восстановления углов прилета частиц уже решается стандартными алгоритмическими методами [1–3]. Цель этой работы состоит в создании нейронных сетей, которые бы справлялись с данной задачей лучше. Нейронные сети активно используются в экспериментах, связанных с другими нейтринными телескопами, где они показывают многообещающие результаты [4, 5]. В данной задаче возможно использовать разные типы нейронных сетей (сверточные, рекуррентные и графовые нейронные сети) и сравнивать их эффективность.

Используются данные монте-карловской симуляции однокластерных событий прилета атмосферных нейтрино с энергиями от 10 ГэВ до 100 ТэВ. Сигналы очищены от ложных срабатываний и упорядочены по времени, на практике фильтрация производится другой нейронной сетью. Сеть предсказывает азимутальный и полярный углы прилета нейтрино, оценка точности идет по медианным разрешениям этих углов и сравнивается с имеющейся стандартной реконструкцией.

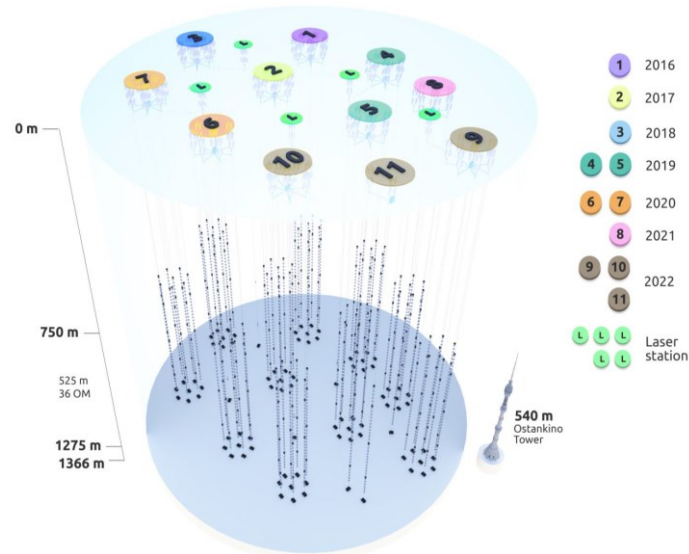


Рис. 1. Схема детектора Baikal-GVD

В результате было показано, что нейронные сети могут справляться точнее стандартной реконструкции при восстановлении малых полярных углов прилета. Среди рассматриваемых видов нейронных сетей самые перспективные результаты показали графовые нейронные сети. Было выявлено, что нейронные сети, как и стандартная реконструкция, менее эффективно восстанавливают азимутальный угол прилета. Данный эффект объясняется особенностью конструкции кластеров в телескопе. В дальнейшем рассматривается использование нейронных сетей для уточнения работы стандартной реконструкции и использование данных о временных разрешениях реконструкции, чтобы улучшить качество работы существующих моделей.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-20063.

### Литература

1. *Belolaptikov I.* [et al.]. Neutrino Telescope in Lake Baikal: Present and Nearest Future // arXiv preprint. [2021]. arXiv: 2109.14344.
2. *Allakhverdyan V. A.* [et al.]. Measuring muon tracks in Baikal-GVD using a fast reconstruction algorithm // Eur. Phys. J. C. 2021. V. 81: 1025. DOI: 10.1140/epjc/s10052-021-09825-y.
3. *Allakhverdyan V. A.* [et al.]. Observations of track-like neutrino events with Baikal-GVD // PoS ICRC2021. 2021. V. 95: 177. DOI: 10.22323/1.395.1177.
4. *Shiqi Yu.* Direction Reconstruction using a CNN for GeV-Scale Neutrinos in IceCube // JINST. 2021. V. 16: C11001. DOI: 10.1088/1748-0221/16/11/C11001.
5. *Choma N.* [et al.]. Graph Neural Networks for IceCube Signal Classification // 2018 17th IEEE International Conference on Machine Learning and Applications (ICMLA), Orlando, FL, USA, 2018. P.386–391. DOI: 10.1109/ICMLA.2018.00064.

УДК 539.12.01

## Пионный канал распада темного скаляра

*Е. А. Крюкова*

Институт ядерных исследований РАН  
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Результаты многочисленных экспериментов в космологии, астрофизике и физике элементарных частиц указывают на необходимость расширения Стандартной модели (СМ). При этом предполагается

существование скрытого сектора, поля которого не преобразуются по калибровочной группе СМ, и так называемых частиц-медиаторов, взаимодействующих как с частицами СМ, так и с частицами скрытого сектора. Существует четыре основных способа-портала записать перенормируемое взаимодействие полей СМ с медиаторами. Простейшие модели расширения СМ включают медиатор, принадлежащий одному из порталов: векторному (медиатор — темный фотон), скалярному (темный скаляр), фермионному (тяжелый нейтральный лептон) или псевдоскалярному (аксиноподобная частица).

В настоящее время активно проводятся экспериментальные поиски таких гипотетических долгоживущих частиц-медиаторов, предложено большое число новых проектов [1]. Для оценки их чувствительности требуется тщательное изучение процессов рождения и распада данных частиц. В частности, известные в литературе оценки для полной ширины распада темного скаляра в области масс порядка 1 ГэВ дают результаты, отличающиеся качественно и в сотни раз по величине [2]. Основную трудность вызывает оценка ширины каналов распада на пару пионов и каонов, поскольку вычисления проводятся в области энергий между областями применимости киральной теории возмущений и квантовой хромодинамики.

В работе рассмотрены распады гипотетического темного скаляра массой порядка 1 ГэВ. За счет смешивания с бозоном Хиггса темный скаляр на древесном уровне взаимодействует с лептонами и кварками, а на однопетлевом — с фотонами и глюонами. Используя результаты работы [3] по определению гравитационных формфакторов пиона из данных эксперимента Belle в реакции  $\gamma^* \gamma \rightarrow \pi^0 \pi^0$ , получена оценка для ширины распада темного скаляра на пары нейтральных и заряженных пионов. В области малых масс темного скаляра полученный результат воспроизводит известную оценку [4] по киральной теории возмущений. В области масс скаляра 1,5–2 ГэВ результат близок по величине к ширине распада темного скаляра в глюоны, вычисленной в NLO порядке по константе сильного взаимодействия. В отличие от многих известных в литературе результатов, ширина распада не обладает резонансным пиком в районе 1 ГэВ, что связано с предполагаемым отсутствием вклада четырехкваркового резонанса  $f_0(980)$  в гравитационные формфакторы пиона и подтверждается экспериментальными данными Belle [3].

Кроме того, получены парциальные ширины распада темного скаляра на пары частиц СМ и его полное время жизни. Обновлены кривые чувствительности в плоскости параметров модели для предложенных экспериментов по поиску темного скаляра на установках MATHUSLA, CODEX-b, DarkQuest и др.

Работа выполнена при поддержке фонда развития теоретической физики и математики «Базис», грант № 21-2-10-37-1.

### Литература

1. *Batell B., Blinov N., Hearty C., McGehee R.* Exploring dark sector portals with high intensity experiments // arXiv preprint. [2022]. arXiv:2207.06905.
2. *Winkler M. W.* Decay and detection of a light scalar boson mixing with the Higgs boson // Phys. Rev. D. 2019. V. 99: 015018.
3. *Kumano S., Song Q.-T., Teryaev O. V.* Hadron tomography by generalized distribution amplitudes in the pion-pair production process and gravitational form factors for pion // Phys. Rev. D. 2018. V. 97: 014020.
4. *Voloshin M. B.* Once again about the role of gluonic mechanism in interaction of light Higgs boson with hadrons // Sov. J. Nucl. Phys. 1986. V. 44. P. 478–485.

УДК 520.343

### Исследование влияния магнитного поля на фотоэлектронные умножители, применяемые в проекте Большого баксанского нейтринного телескопа

*А. Д. Луканов*

Институт ядерных исследований РАН

Баксанский большой нейтринный телескоп — это многоцелевой жидко-сцинтилляционный детектор нейтринный детектор с массой мишени 10 кт. Фотоэлектронные умножители, особенно ФЭУ большого размера, используемые в проекте, чувствительны к магнитному полю. Влияние магнитного поля негативно сказывается на фотоэлектронном разрешении умножителей, а также оно влияет на разброс времени пролета фотоэлектронов в ФЭУ, что в итоге влияет на точность локализации сцинтилляционной вспышки в объеме мишени. В таком случае необходимо использование системы компенсации магнитного поля.

Для исследования влияния магнитного поля выбран ФЭУ Hamamatsu R7081-100 WA-S70, который используется в проекте Большого баксанского нейтринного телескопа. Для создания магнитного поля

используются три пары квадратных колец Гельмгольца. Расчет магнитного поля, создаваемого катушками, производился с помощью закона Био–Савара–Лапласа:

$$d\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{I[d\mathbf{l}, \mathbf{r}]}{r^3},$$

где  $\mu_0$  — магнитная постоянная,  $I$  — сила тока,  $d\mathbf{l}$  — элемент тока, для которого рассчитывается индукция,  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор в точку наблюдения, а направление вектора индукции определяется правилом буравчика.

Как видно из рис. 1, конфигурация катушек в виде квадрата позволяет создать однородное магнитное поле между кольцами. Три пары катушек позволяют создать магнитное поле в трех направлениях, компенсируя магнитное поле Земли. Каждая пара катушек расположена перпендикулярно друг к другу, как показано на рис. 2, создавая однородное магнитное поле в объеме  $50 \times 50 \times 50$  см. При 10 витках и силе тока в катушках в 2 А создается магнитная индукция в 0,3 Гс. Таким образом, производится исследование влияния в разных направлениях магнитного поля.

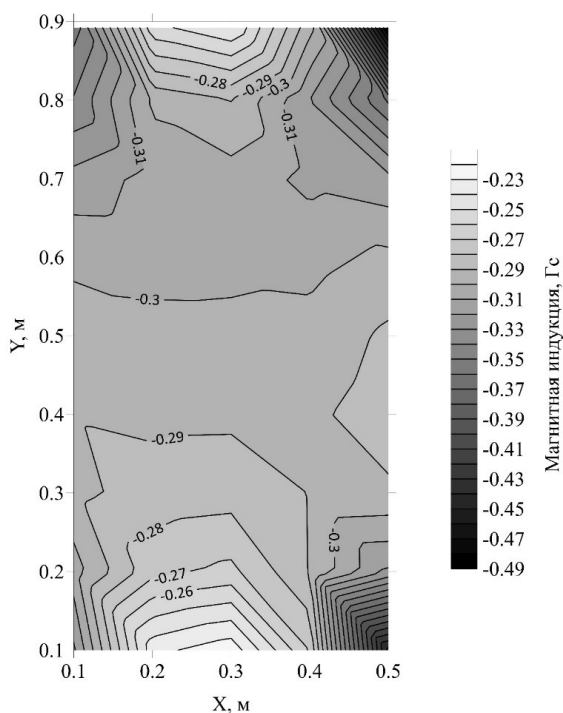


Рис. 5. Магнитная индукция, создаваемая катушками Гельмгольца

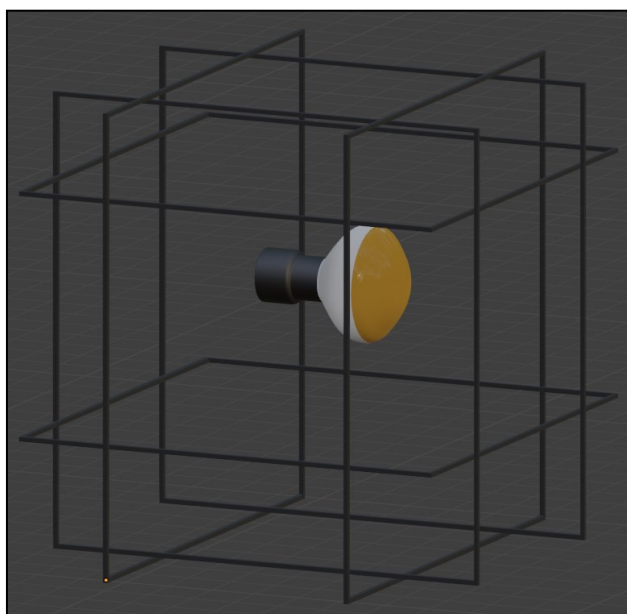


Рис. 6. 3D-модель установки для исследования влияния магнитного поля на ФЭУ

## Литература

1. *Sinev V. V.* [et al.] Large-volume detector at the Baksan Neutrino Observatory for studies of natural neutrino fluxes for purposes of geo- and astrophysics // Phys. At. Nucl. 2017. V. 80. P. 446–554.
2. *Malyshekin Yu. M.* [et al.] Modeling of a MeV-scale particle detector based on organic liquid scintillator // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A. 2020. V. 951: 162920.
3. *Ma K. J.* [et al.] A new Baksan Large Neutrino Telescope: the project's status // Instrum. Methods Phys. Res. A. 2011. V. 629. P. 93–100.
4. *Barros N.* [et al.] Characterization of the ETEL D784UKFLB 11 inch Photomultiplier Tube // arXiv preprint. [2015]. arXiv: 1512.06916v2.
5. *Хмелевской В. К., Костицын В. И.* Основы геофизических методов. — Пермь: Пермский ун-т, 2010.

УДК 621.384.82

## Разработка времяпролетного детектора быстрых нейтронов для эксперимента VM@N

*А. И. Махнев*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рассмотрены назначение и физическая схема времяпролетного детектора быстрых нейтронов для эксперимента VM@N [1].

Детектор предназначен для идентификации и измерения энергии нейтронов, образующихся в процессе ядро-ядерных столкновений, в диапазоне от 300 МэВ до 4 ГэВ с точностью до нескольких процентов. Измерение энергии выполняется за счет измерения времени пролета нейтронов от момента попадания частицы пучка в фиксированную мишень до момента попадания нейтрона в детектор.

Предполагается, что физическая схема детектора будет представлять собой сборку из чередующихся слоев (модулей) из поглотителя и сцинтилляционных чувствительных элементов. Полное количество таких слоев (сцинтиллятор + поглотитель) нейтронного детектора — 16.

Модульная структура позволяет обеспечить технологичность изготовления компонентов детектора, высокую ремонтпригодность и простоту пусконаладочных работ. Предполагаемая структура детектора приведена на рис. 1.

Каждый модуль представляет собой сборку из сцинтилляторов, твердотельных фотоприемников (многопиксельных счетчиков фотонов) и усилителей, помещенных в светозащитный корпус.

Были проведены работы по разработке, оптимизации, сборке, развертыванию и испытанию маломасштабного прототипа детектора. В ходе разработки прототипа и его испытаний на сеансе на эксперименте VM@N Xe+CsI в декабре 2022 г. была проведена оптимизация размера сцинтилляционной ячейки. Получены удовлетворительные временные и амплитудные характеристики для ячеек размером 40×40×25 мм [2]. По техническому заданию на полноразмерный детектор определен размер слоя в 11×11 ячеек.

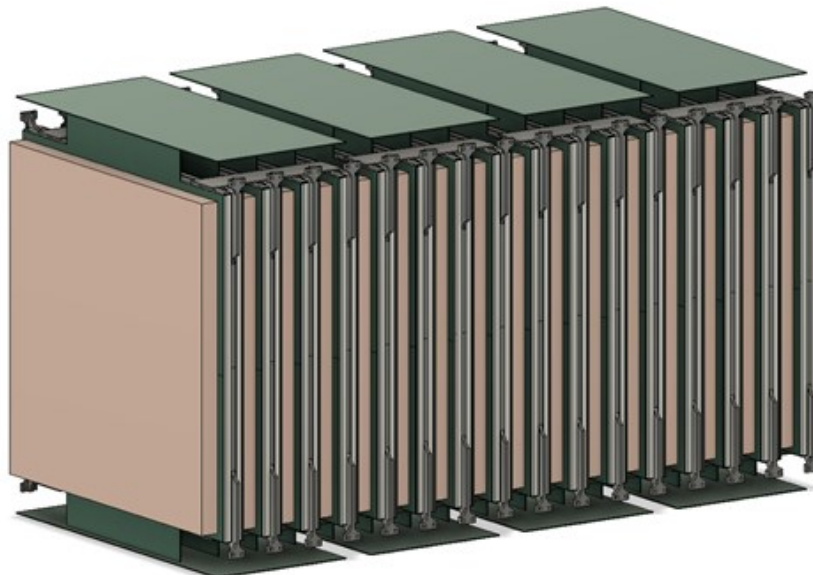


Рис. 1. Схема времяпролетного детектора нейтронов

Значительное количество каналов детектора вызывает сложности в построении электронного тракта считывания сигналов. Общее количество каналов считывания 1936. При проектировании подобных трактов необходимо минимизировать количество используемых разъемов, кабелей и сопряжений с целью улучшения электромагнитной совместимости детектора, упрощения конструкции и обслуживания системы. В разрабатываемом детекторе практически отсутствуют сигнальные кабели, благодаря размещению считывающей аппаратуры непосредственно на детекторе: каждые 4 модуля непосредственно соединяются с платой считывания.

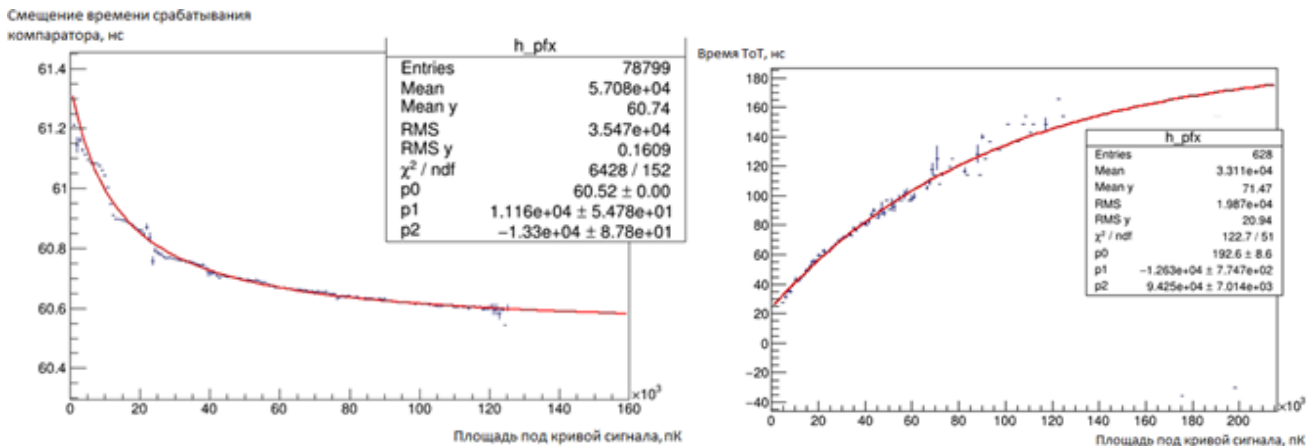


Рис. 2. Зависимость смещения времени переднего фронта от интеграла входного сигнала

Рис. 3. Зависимость длины сигнала ToT от интеграла входного сигнала

Непосредственное размещение считывающей аппаратуры также позволяет сократить объем передаваемых данных. Данные о времени пролета и амплитуде события измеряются с помощью компаратора, обрабатывающего сигнал методом Time-Over-Threshold (ToT). Выходной сигнал компаратора считывается ПЛИС, конфигурация которой присваивает событию временную метку и измеряет длину сигнала. По длине сигнала вычисляется амплитуда события, позволяющая как выполнять калориметрические измерения, так и проводить коррекцию временной метки события с помощью учета зависимости формы переднего фронта сигнала от его амплитуды.

Была проведена характеристика ToT-метода в данном применении с помощью измерений отклика фотоприемника на сигнал от субнаносекундного лазера и сцинтиллятора, облученного потоком космических мюонов. Получены характеристики зависимости длины сигнала от амплитуды (рис. 2) и зависимости смещения точки срабатывания компаратора от амплитуды (рис. 3).

## Литература

1. *Kapishin M.* [et al.]. Heavy Ion BM@N and MPD Experiments at NICA // JPS Conf. Proc. 2020 V. 32: 10093.
2. *Губер Ф. Ф.* [и др.]. Временное разрешение и световыход образцов сцинтилляционных детекторов для разрабатываемого времяпролетного детектора нейтронов эксперимента BM@N // Приборы и техника эксперимента. 2023. № 4. С. 36–41.

УДК 539.123

## Применение методов машинного обучения для разделения событий, вызванных мюонами и нейтрино, в эксперименте BAIKAL-GVD

*А. В. Мацейко*

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

Целью работы является создание основанных на нейронных сетях методов для решения задач обработки больших данных нейтринного телескопа Baikal-GVD. Целью эксперимента является исследование потока космических нейтрино высоких энергий в северном полушарии Земли. Установка эксперимента представляет собой набор оптических модулей (ОМ) — это фотоэлектронные умножители (ФЭУ),



улавливающие черенковское излучение [2] рожденных 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 так называемые кластеры (см. рис. 1).

В данной работе рассматриваются события детектирования телескопом сигнала, вызванного атмосферными мюонами или астрофизическими нейтрино. Главная задача этой работы — разработать методы машинного обучения для разделения мюонной и нейтринной компонент в наборе событий с точностью, превосходящей точность стандартных алгоритмических методов [1, 3, 4]. Для разработки, отладки и проверки методов в работе используются монте-карловское моделирование, предоставленное коллаборацией Baikal. Оно содержит отклики детекторов одного кластера после пролета мюонов или нейтрино с энергиями от 10 ГэВ до 100 ТэВ, а также шумовые срабатывания ОМ [5–8]. На этих событиях и тренируются нейронные сети.

В выполняемой работе стоят следующие задачи.

Классификация отдельных событий на мюонные и нейтринные с максимальной точностью.

Определение с максимальной точностью в фиксированном наборе данных доли нейтринных событий среди всех событий.

Дальнейшее улучшение разработанных в задачах 1) и 2) методов для применения не только на МК симулированных событиях, но и на реальных экспериментальных событиях.

В ходе работы было рассмотрено два подхода к представлению данных с оптических модулей телескопа. В первом событие представляло собой имитирующей геометрию кластера 3D-массив, каждая ячейка которого отвечала одному ОМ. Такой подход позволяет думать о кластере как о трехмерном изображении. Во втором сработавшие ОМ упорядочивались по времени и выстраивались в одномерный массив. Это позволяет лучше понять, как разворачивалось событие во времени. В обоих подходах каждый ОМ несет 5 доступных каналов информации — 3 координаты, время срабатывания, прошедший заряд (число фотоэлектронов). Выяснилось, что второй подход дает лучшую точность и производительность для аналогичных сверточных нейронных сетей. Кроме того, он позволяет применять блоки рекуррентных нейронных сетей, специально разработанных для обработки временных последовательностей.

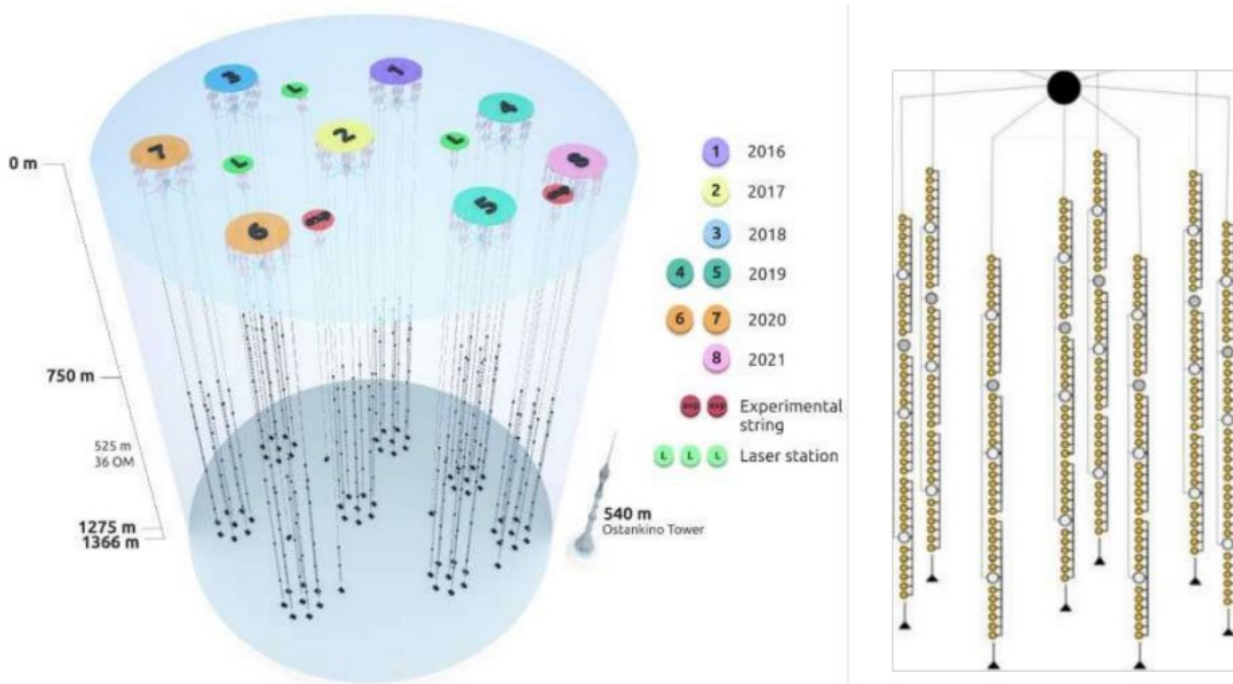


Рис. 1. Слева: схематический вид детектора Baikal-GVD. Годовой прогресс развертывания детектора показан в легенде. Справа: схема кластера Baikal-GVD (сжатый по вертикали)

На данный момент лучшая разработанная нейронная сеть имеет следующую архитектуру. Массив данных кластера передается на вход нескольким сверточным слоям (CNN) [9], соединенным остаточными связями (residual connections) [10]. После них результат сверток подается на вход рекуррентной нейронной сети (RNN), а именно блокам LSTM [11]. На выходе имеем предсказание сети — уверенность от 0 до 1, что данное событие является нейтринным. Итоговый критерий отбора является выставление порога от 0 до 1, выше которого события принимаются за нейтринные.

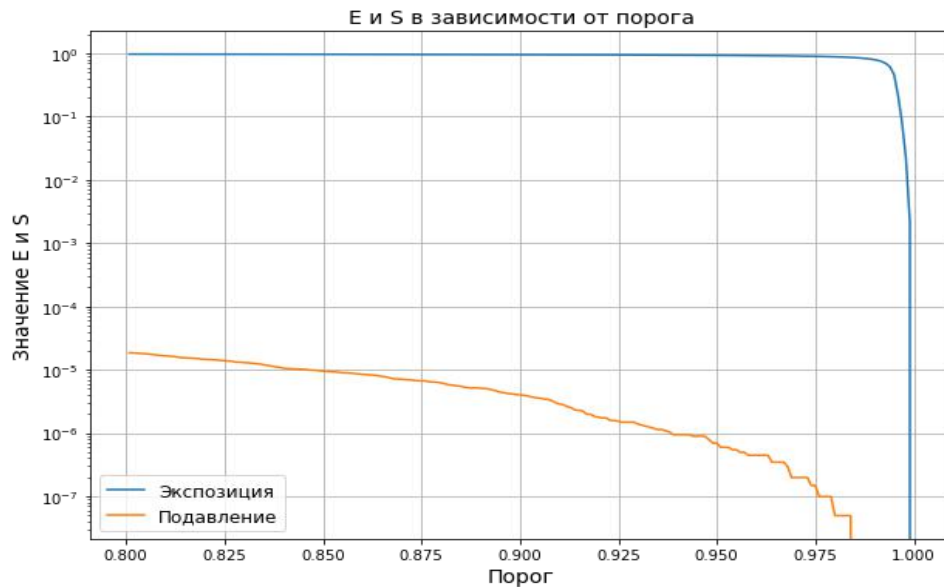


Рис. 2. По оси  $X$  — значение порога классификации событий. По оси  $Y$  — значения величин  $E$  и  $S$  («экспозиция» и «подавления» соответственно), где  $E$  — доля событий, инициированных нейтрино, предсказание для которых больше порога классификации,  $S$  — доля событий, инициированных мюонами, предсказание для которых больше порога классификации

Для решения задачи 1 точность нейронных сетей оценивалась на независимом монте-карловском наборе событий (нейросеть не «знала» о них во время обучения). На данный момент разработанные методы способны выделить событие, индуцированное нейтрино, на фоне порядка  $10^6$  событий (см. рис. 2), инициированных мюонами, что сравнимо с точностью классических алгоритмов реконструкции коллаборации Baikal.

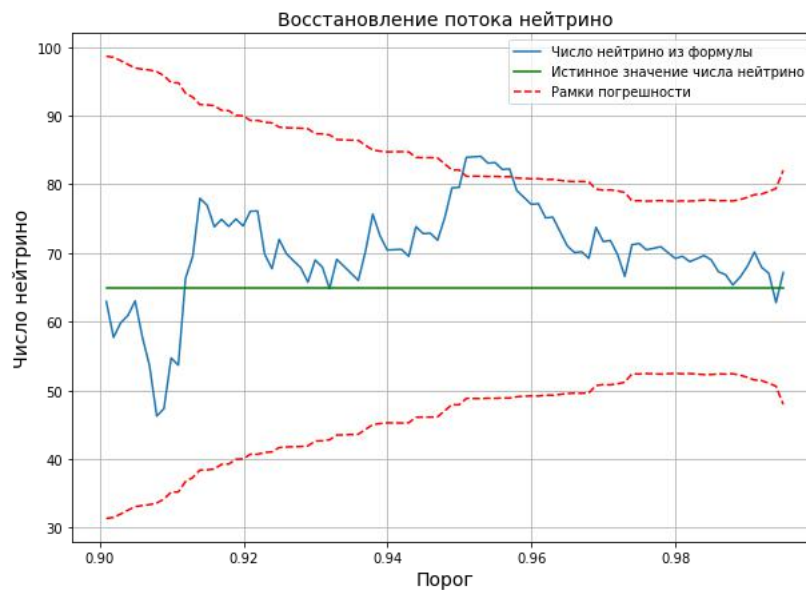


Рис. 3. По оси  $X$  — значение порога классификации событий. По оси  $Y$  — число событий, инициированных нейтрино, в данном наборе событий. Зеленая линия отражает истинное число событий в наборе, вызванных нейтрино. Синяя линия отражает число событий, полученное с помощью нейросетей и разработанного алгоритма, в зависимости от порога классификации. Красный пунктир показывает рамки рассчитанной погрешности разработанного алгоритма в зависимости от порога классификации. Отношение событий, вызванных мюонами, к событиям, вызванным нейтрино, для данного набора событий приблизительно 517 000.

Для решения задачи 2 на основе разработанных нейронных сетей был создан алгоритм определения общего числа событий, индуцированных нейтрино, в наборе данных и оценки ошибки этого числа. В этом алгоритме при фиксированном пороге классификации  $\xi$  сперва оцениваются характеристики  $E_0$  и  $S_0$  (см. подпись к рис. 2) нейронной сети на известном (нулевом) наборе данных (МК-симуляции). Затем через сеть пропускается неизвестный набор ( $i$ -й набор) данных с общим числом событий  $n_i$ , где требуется

определить число нейтрино. Результатом работы сети будет число событий, оставшихся после порога классификации  $n_i(\xi)$ . Искомое число нейтрино оценивается как

$$n_{\theta}^i = \frac{n^i(\xi) - S_0 n^i}{E_0 - S_0}. \quad (1)$$

Далее методами теории вероятности считается ошибка этой оценки:

$$\sigma_{n_{\theta}^i}^2 = \frac{(n^i(\xi) - S_0 n^i)^2}{(E_0 - S_0)^4} \cdot \frac{E_0(1 - E_0)}{n_{\nu}^0} + \frac{(n^i(\xi) - E_0 n^i)^2}{(E_0 - S_0)^4} \cdot \frac{S_0(1 - S_0)}{n_{\mu}^0} + \frac{n^i(\xi) + S_0^2 n^i - 2S_0 n^i(\xi)}{(E_0 - S_0)^2}. \quad (2)$$

Алгоритм был применен на независимом наборе симулированных Монте-Карло событий и показал свою состоятельность: предсказанное число нейтринных событий в наборе (нейтринный поток) отличается от настоящего значения в пределах оцененной погрешности (рис. 3).

Таким образом, задачи работы 1 и 2 можно считать частично решенными. Применение полученных результатов на экспериментальных данных (задача 3) является следующим шагом исследования.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-20063.

### Литература

1. *Belolaptikov I.* [et al.]. Neutrino telescope in Lake Baikal: present and nearest future // arXiv preprint. [2021]. arXiv: 2109.14344.
2. *Dzhilkibaev Zh.-A. M., Domogatsky G. V., Suvorova O. V.* Cherenkov detectors for high-energy neutrino astrophysics // *Physics-Uspekhi*. 2015. V. 58(5). P. 495–502.
3. *Allakhverdyan V. A.* [et al.]. Measuring muon tracks in Baikal-GVD using a fast reconstruction algorithm // *Eur. Phys. J. C*. 2021. V. 81: 1025.
4. *Allakhverdyan V. A.* [et al.]. Observations of track-like neutrino events with Baikal-GVD // *PoS*. 2021. V. ICRC2021. P. 1177.
5. *Kuhlmann S., Lai H. L., Huston J.* [et al.]. Improved parton distributions from global analysis of recent deep inelastic scattering and inclusive jet data // *Phys. Rev. D*. 1997. V. 55(3). P. 1280–1296. DOI: 10.1103/PhysRevD.55.1280.
6. *Capdevielle J. N., Heck D., Knapp J.* [et al.]. CORSIKA: a Monte Carlo code to simulate extensive air showers. — KIT-Bibliothek. Preprint, 1998. DOI: 10.5445/IR/270043064.
7. *Schoo S., Haungs A., Kang D.* [et al.]. The KASCADE cosmic-ray data centre KCDC: granting open access to astroparticle physics research data // *Eur. Phys. J. C*. 2018. V. 78: 741. DOI: 10.1140/epjc/s10052-018-6221-2.
8. *Klimushin S. I., Sokalski I. A., Bugaev E. V.* MUM: flexible precise Monte Carlo algorithm for muon propagation through thick layers of matter // *Phys. Rev. D*. 2001. V. 64: 074015. DOI: 10.1103/PhysRevD.64.074015.
9. *Ronneberger O., Fischer P., Brox T.* U-Net: Convolutional networks for biomedical image segmentation // arXiv preprint. [2015]. arXiv: 1505.04597.
10. *He K., Zhang X., Ren S., Sun J.* Deep residual learning for image recognition // arXiv preprint. [2015]. arXiv: 1512.03385.
11. *Sak H., Senior A., Beaufays F.* Long short-term memory based recurrent neural network architectures for large vocabulary speech recognition // arXiv preprint. [2014]. arXiv: 1402.1128.

УДК 539.1.07

### Реконструкция треков протонов с использованием пиксельных детекторов для протонной компьютерной томографии

**В. В. Петров, В. И. Жеребчевский, В. П. Кондратьев, Н. А. Мальцев,  
Н. А. Прокофьев, Е. О. Землин, И. И. Ерыгин**

Санкт-Петербургский государственный университет

Протонная терапия является передовым методом лечения онкологических заболеваний. Основное преимущество облучения протонами по сравнению с терапией, использующей рентгеновское излучение, гамма-излучение и электроны — наличие пика Брэгга, что позволяет точно доставить дозу в область опухоли и минимизировать воздействие на здоровые ткани. Сегодня план дозовых нагрузок составляется на основе данных о тормозной способности протонов в соответствующих тканях, полученных с использованием рентгеновской компьютерной томографии. Однако преобразование карт поглощения рентгеновского излучения в тканях в карты тормозной способности протонов в этих же тканях вносит ошибку в оценку положения пика Брэгга в организме [1]. В результате максимальная доза может быть доставлена в область рядом с опухолью, задев здоровые ткани. Поэтому необходимо проводить визуализацию места

расположения опухоли в организме с помощью тех же частиц, что и для терапии, сконструировав протонный томограф.

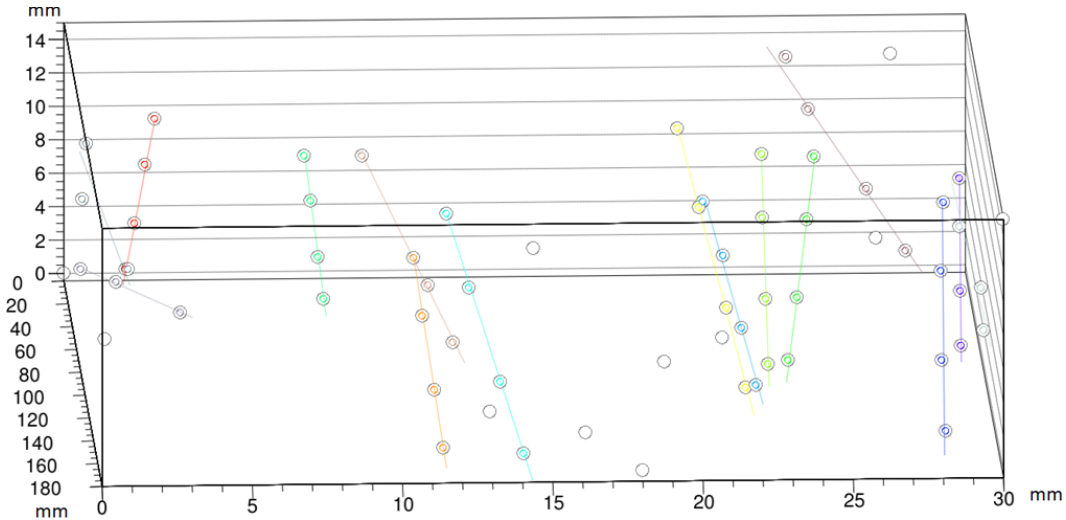


Рис. 1. Пример реконструкции треков методом клеточного аппарата

В настоящее время пиксельные детекторы хорошо зарекомендовали себя в экспериментах с элементарными частицами [2, 3]. Одно из их основных преимуществ — высокое пространственное разрешение. По этой причине при создании протонного томографа можно использовать такие пиксельные детекторы. Это даст возможность получить трехмерную карту тормозной способности протонов в облучаемой области с минимумом погрешностей.

В данной работе проводились исследования идентификационной способности пиксельных детекторов для их использования при создании протонного томографа. Детекторы работали в режиме телескопа на пучке протонов энергии 200 МэВ. Реконструкция треков протонов выполнена методом клеточного аппарата. Пример реконструированных треков показан на рис. 1.

В ходе эксперимента между пиксельными детекторами ставились поглотители и фантомы для моделирования прохождения пучка протонов в органах и тканях, а также для разработки оптимальной методики реконструкции треков. Исследовано отклонение реконструированного трека от прямой при рассеянии протонов на различных поглотителях. Полученные данные, вместе с используемой методикой реконструкции треков, позволили получить четкие проекции изображений фантомов и поглотителей при прохождении сквозь них пучка протонов.

### Литература

1. *Alme J.* [et al.]. A High-Granularity Digital Tracking Calorimeter Optimized for Proton CT // *Front. Phys.* 2020. V. 8. P. 460.
2. *Abelev B.* [et al.]. Technical Design Report for the Upgrade of the ALICE Inner Tracking System // *J. Phys. G. Nucl. Part. Phys.* 2014. V. 41: 087002.
3. *Жеребчевский В.* [и др.] Использование кремниевых пиксельных детекторов для внутренней трековой системы эксперимента MPD на коллайдере NICA // *Изв. Российской акад. наук. Сер. физическая.* 2021. Т. 85. № 5. С. 702–709.

УДК 539.126.4

## Обнаружение новых состояний в спектре инвариантной массы $J/\psi J/\psi$ в протон-протонных столкновениях в эксперименте CMS

*Н. К. Петров*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Теория сильного взаимодействия предсказывает возможность существования экзотических адронов, состоящих из четырех и более кварков. За последние десятилетия интерес к экзотике то возростал, то падал. В 2003 г. коллаборация Belle обнаружила частицу  $X(3872)$ , что выдвинуло изучение экзотики

на передовые позиции адронной физики [1]. С тех пор было открыто множество кандидатов в тетра- и пентакварки, однако внутренняя структура этих частиц все еще остается загадкой [2–6].

Поиски тетракварков, полностью состоящих из тяжелых кварков, стали многообещающими в последние годы, благодаря огромным энергиям и светимостям, достигнутым на БАКе. Первые поиски подобной экзотики проводились экспериментами CMS и LHCb в спектре инвариантной массы  $\Upsilon_{\mu\mu} + \mu\mu$ , однако значимых сигналов обнаружено не было [7, 8].

В 2020 г. коллаборация LHCb, исследуя спектр инвариантной массы  $J/\psi J/\psi$ , обнаружила структуру X(6900), являющуюся кандидатом в полностью очарованный тетракварк [9]. Чтобы описать распределение по инвариантной массе, коллаборация LHCb использовала две модели: первая содержала несколько неинтерферирующих Брейт–Вигнеров плюс фоновые компоненты, а вторая допускала интерференцию между Брейт–Вигнером и одной из фоновых компонент. Тем не менее данная статья породила больше вопросов, чем ответов. Поэтому данный участок нуждается в детальном и независимом исследовании.

В настоящей работе представлено исследование спектра инвариантной массы  $J/\psi J/\psi$  вблизи порога в протон-протонных столкновениях при энергии 13 ТэВ в эксперименте CMS [10]. В модели, предполагающей отсутствие интерференции между сигналами и сигналами и фоном, были обнаружены три структуры; две из них со значимостью, превышающей 5 стандартных отклонений с массами  $6927 \pm 9(\text{стат.}) \pm 5(\text{сист.})$  МэВ и  $6552 \pm 10(\text{стат.}) \pm 12(\text{сист.})$  МэВ. Последний сигнал имеет локальную значимость 4,1 стандартных отклонений и массу  $7287 \pm 19(\text{стат.}) \pm 5(\text{сист.})$ .

### Литература

1. *Choi S.-K., Olsen S.L.* [et al.]. Observation of a narrow charmoniumlike state in exclusive  $B_{\pm} \rightarrow K_{\pm}\pi\pi - J/\psi$  decays // *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 91: 262001. DOI:10.1103/PhysRevLett.91.262001.
2. *Aaij R., Beaucourt L., Chefderville M., Decamp D.* [et al.]. Observation of  $J/\psi\phi$  resonances consistent with pentaquark states in  $\Lambda_0 b \rightarrow J/\psi K - p$  decays // *Phys. Rev. Lett.* 2015. V. 115: 072001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.072001.
3. *Aaij R.* [et al.]. Observation of a narrow pentaquark state,  $P_c(4312)^+$ , and of the two-peak structure of the  $P_c(4450)^+//$  *Phys. Rev. Lett.* 2019. V. 122: 222001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.122.222001.
4. *Aaltonen T., González Álvarez B., Amerio S., Amidei D.* [et al.]. Observation of the Y(4140) structure in the  $J/\psi\phi$  mass spectrum in  $B_{\pm} \rightarrow J/\psi\phi K_{\pm}$  decays // *Mod. Phys. Lett. A.* 2017. V. 32: 1750139. DOI: 10.1142/S0217732317501395.
5. *Chatrchyan S.* [et al.]. Observation of a peaking structure in the  $J/\psi\phi$  mass spectrum from  $B_{\pm} \rightarrow J/\psi\phi K_{\pm}$  decays // *Phys. Lett. B.* 2014. V. 734: 261. DOI: 10.1016/j.physletb.2014.05.055.
6. *Aaij R.* [et al.]. Observation of  $J/\psi\phi$  structures consistent with exotic states from amplitude analysis of  $B^+ \rightarrow J/\psi\phi K^+$  decays // *Phys. Rev. Lett.* 2017. V. 118: 022003. DOI: 10.1103/PhysRevLett.118.022003.
7. *Aaij R., Adeva B., Adinolfi M.* [et al.]. Search for beautiful tetraquarks in the Y(1S) $\mu^+\mu^-$  invariant-mass spectrum // *JHEP.* 2018. V. 10: 086. DOI: 10.1007/JHEP10(2018)086.
8. *Sirunyan A.M., Tumasyan A., Adam W.* [et al.]. Measurement of the Y(1S) pair production cross section and search for resonances decaying to Y(1S) $\mu^+\mu^-$  in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 13$  TeV // *Phys. Lett. B.* 2020. V. 808: 135578. DOI: 10.1016/j.physletb.2020.135578.
9. *Aaij R., Abellán Beteta C., Ackernley T.* [et al.]. Observation of structure in the  $J/\psi$ -pair mass spectrum // *Sci. Bull.* 2020. V. 65: 1983. DOI: 10.1016/j.scib.2020.08.032.
10. *Chatrchyan S.* [et al.]. The CMS experiment at the CERN LHC // *JINST.* 2008. V. 3: S08004.

УДК 53.087.45

### Диагностика пучков по свечению остаточного газа на ускорителе ИЯИ РАН

*И. И. Полоник<sup>1</sup>, С. А. Гаврилов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт ядерных исследований РАН

Для измерения поперечного профиля пучков протонов на канале транспортировки линейного ускорителя ИЯИ РАН изготовлен и протестирован датчик профиля пучка по свечению остаточного газа. Базовый принцип работы ДС основан на том, что заряженные частицы пучка ионизируют и возбуждают молекулы остаточного газа. Молекулы остаточного газа, находящиеся в возбужденном состоянии, испускают фотоны. На рис. 1 изображена базовая схема ДС: часть фотонов, прошедшая через окно, фокусируется оптической системой на ПЗС-матрицу. По распределению фотонов, попавших на ПЗС-матрицу, можно восстановить поперечный профиль пучка [1].

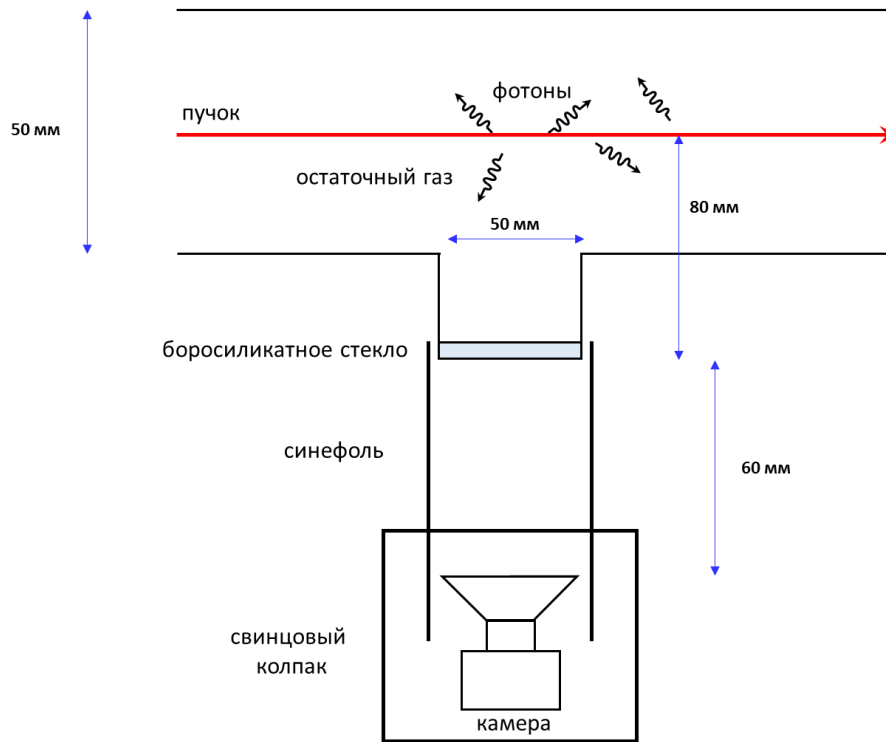


Рис. 1. Схематичное устройство датчика

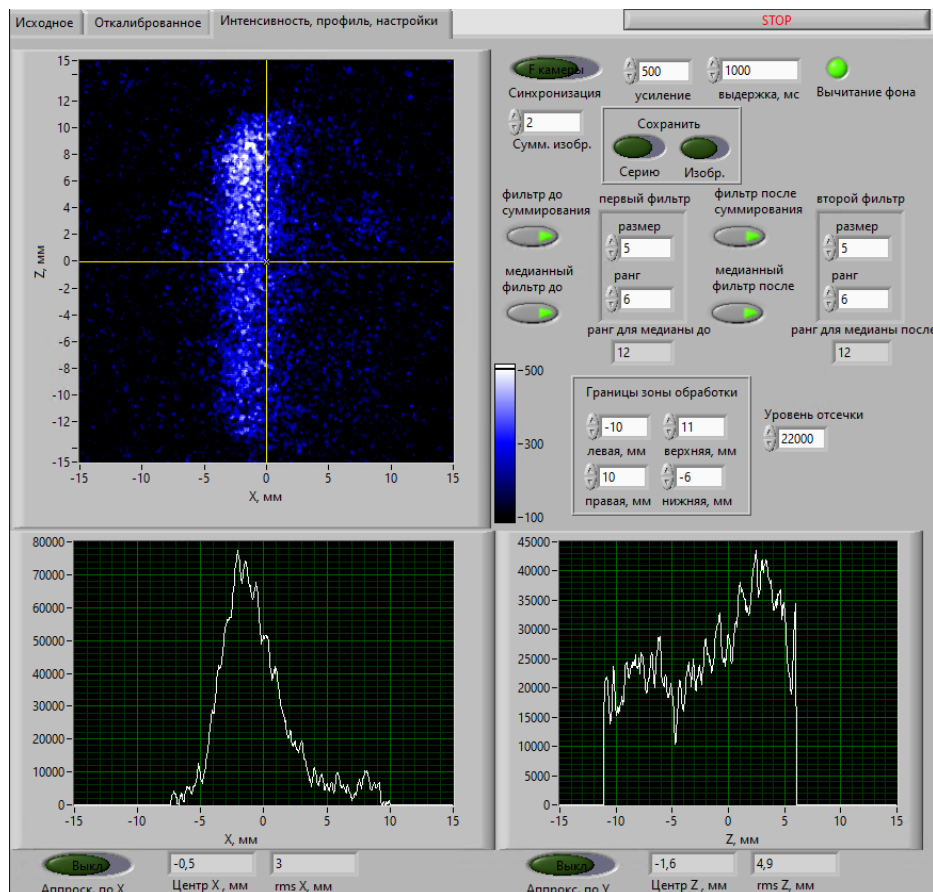


Рис. 2. Пример измерения профиля пучка

В качестве камеры использовались стандартные камеры машинного зрения. Для подавления внешней оптической засветки камера закрывалась синефолью, а труба изнутри зачернялась для подавления переотражения фотонов от стенок, также камера оборачивалась 5 мм свинцовым колпаком для уменьшения рентгеновского фона и защиты камеры от радиационных повреждений. Схема датчика приведена на рис. 1.

Для обработки профиля пучка в режиме реального времени разработано программное обеспечение в среде LabVIEW, позволяющее удаленно управлять усилением и выдержкой камеры, вычитать фон, применять ранговую фильтрацию и строить проекции профиля пучка. На рис. 2 приведен пример работы программы при измерении профиля протонного пучка с энергией 400 КэВ, током 60 мА, изображение и профили получены в результате суммирования двух изображений с выдержкой по 1 с.

При поиске оптимальных параметров фильтров для измерения профиля было обнаружено, что при использовании низких рангов фильтра после суммирования измеренный профиль существенно искажается и соответствует только ядру пучка. На рис. 3 приведены измерения профиля при протонном пучке 70 мА, полученные при суммировании двух изображений с выдержкой по 5 с, размером окна фильтрации, равным 5, и различными рангами.

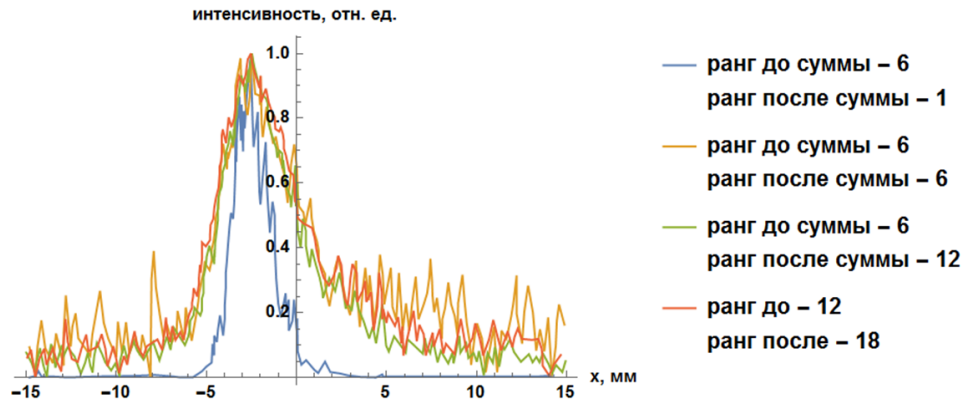


Рис. 3. Зависимость измеренного профиля от рангов фильтров

### Литература

1. *Becker F.* Beam Induced Fluorescence Monitors // Proc. of DIPAC2011, Hamburg, Germany. P. 575–579.

УДК 53.01

## Двойное комптоновское рассеяние в сильно замагниченной плазме

*Т. А. Пухов*

Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова

В современной физике сильно замагниченных нейтронных звезд одной из принципиальных проблем является описание особенностей наблюдаемых спектров в области рентгеновских и гамма-частот, обусловленных, по-видимому, влиянием рассеяния, поглощения и рождения фотонов в процессе переноса излучения в сильно замагниченной плазме. Поэтому, в частности, анализ процессов рождения гамма-квантов представляет самостоятельный интерес. В работе рассматривается процесс двойного комптоновского рассеяния,  $e\gamma \rightarrow e\gamma\gamma$ , в присутствии сильно замагниченной, зарядово асимметричной, холодной электронной плазмы с учетом изменения дисперсионных и поляризационных свойств фотонов — как альтернативный механизм изменения числа фотонов, необходимый для более точного решения уравнения переноса с учетом возможного изменения числа фотонов. Насколько нам известно, процесс  $e\gamma \rightarrow e\gamma\gamma$  ранее рассматривался только в плазме без магнитного поля [1].

Анализ собственных значений поляризационного оператора и уравнения дисперсии показывает, что дисперсия фотона моды  $\lambda = 1$  мало отличается от вакуумного закона  $q^2 = 0$ , где  $q^2$  — квадрат 4-импульса фотона, тогда как дисперсия фотона моды  $\lambda = 2$  претерпевает существенные изменения [2]. Показано, что закон дисперсии фотона моды 2 в холодной, почти вырожденной плазме  $T \ll \mu - m$  имеет особенность, связанную с наличием плазменной частоты в представлении реальных электронов плазмы. Этот факт приводит к новым правилам отбора по поляризациям для процесса расщепления фотона. В частности, в области  $q^2 > 0$  запрещены каналы распада  $\gamma_2 \rightarrow \gamma_2\gamma_2$ ,  $\gamma_1 \rightarrow \gamma_1\gamma_2$ ,  $\gamma_1 \rightarrow \gamma_2\gamma_2$ , отвечающие за производство фотонов моды 2.

Для анализа эффективности процесса  $e\gamma \rightarrow e\gamma\gamma$  и возможных астрофизических приложений было получено следующее выражение для дифференциального сечения канала  $e\gamma_2 \rightarrow e\gamma_2\gamma_2$  в области  $T \ll \mu - m$ , удобное для использования в задаче о переносе излучения:

$$\frac{d\sigma_{2\rightarrow 22}}{d\Omega' d\Omega''} \simeq \frac{\alpha^3}{240\pi^2 m^4} (\omega - \omega_{pl})\Theta(\omega - \omega_{pl})\sin^2\theta \sin^2\theta' \sin^2\theta'' [(\omega + \omega_{pl})(23 \cos^2\theta 44 \cos\theta' \cos\theta'' + 23 \cos^2\theta'') - \frac{\omega_{pl}^2}{2\omega} (29 \cos^2\theta 32 \cos\theta' \cos\theta'' + 29 \cos^2\theta'') + \frac{3\omega_{pl}^3}{4\omega^3} (4\omega - \omega_{pl})(\cos\theta' - \cos\theta'')^2],$$

где  $\Theta(x)$  — тэта-функция,  $\theta$ ,  $\theta'$  и  $\theta''$  — углы между импульсами начального и конечных фотонов и направлением магнитного поля соответственно.

### Литература

1. *Lightman A. P.* The double Compton emissivity in a mildly relativistic thermal plasma within the soft photon limit // *Astrophys. J.* 1981. V. 244. P. 392–405.
2. *Chistyakov M. V., Romyantsev D. A., Shlenev D. M.* Photon splitting in a strongly magnetized, charge-asymmetric plasma // *EPJ Web Conf.* 2016. V. 125: 04017.

УДК 539.172.17

## Моделирование образования спектаторных фрагментов в $^{208}\text{Pb}$ – $^{208}\text{Pb}$ -столкновениях в эксперименте MPD на коллайдере NICA

*С. Д. Савенков<sup>1,2</sup>, Р. С. Непейвода<sup>3</sup>, А. О. Светличный<sup>1,2</sup>, И. А. Пшеничников<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт ядерных исследований РАН

<sup>3</sup>Lund University, Sweden

В исследованиях столкновений релятивистских ядер основное внимание уделяется их области перекрытия, называемой файерболом, в которой достигаются плотности и температуры, достаточные для перехода ядерной материи в особое состояние вещества — кварк-глюонную плазму. Нуклоны вне этой области не взаимодействуют с нуклонами ядра-партнера по столкновению и образуют спектаторную материю. Составляющие ее нуклоны и ядерные фрагменты могут быть зарегистрированы с помощью передних детекторов в экспериментах по ядро-ядерным столкновениям. В будущем эксперименте MPD на ускорительном комплексе NICA для этого будет использован калориметр FHCAL [1], способный регистрировать не только нуклоны, но и фрагменты из области спектаторов для определения центральности — величины прицельного параметра столкновения  $b$  и ориентации плоскости реакции в событии. Для вычисления геометрического аксептанса FHCAL, эффективности регистрации спектаторов в нем, совершенствования методов определения центральности требуется детальное моделирование характеристик образующихся спектаторов, включая соотношение между свободными и связанными во фрагменты нуклонами.

В отношении методов описания свойств спектаторов все модели можно условно разделить на два типа. В первом спектаторная материя представлена умеренно возбужденной остаточной ядерной системой, так называемым префрагментом, образующимся после выбивания из начального ядра взаимодействующих нуклонов, попавших в область файерболо. Примером является наша модель Abrasion-Ablation Monte Carlo for Colliders (AAMCC-MST) [2], в которой модель Glauber Monte Carlo [3] используется для вычисления количества провзаимодействовавших нуклонов каждом событии и, соответственно, оставшегося объема спектаторной материи. В AAMCC-MST спектаторный префрагмент может быть представлен не только единой системой, как в периферических столкновениях, но и совокупностью отдельных кластеров, типичной для центральных столкновений [2]. Для формирования кластерной конфигурации используется алгоритм Minimum Spanning Tree (MST). В зависимости от энергии возбуждения, каждый из кластеров, так же как и единый префрагмент, может претерпевать различные вторичные распады [2].

Второй тип моделей представлен транспортными моделями, которые сводят взаимодействия ядер к совокупности столкновений отдельных нуклонов, взаимодействующих друг с другом посредством двухчастичных потенциалов или помещенных в некоторое среднее, зависящее от плотности нуклонов поле. К ним относятся модели типа квантовой молекулярной динамики [4, 5] для ядро-ядерных столкновений, в которых после розыгрыша каждого столкновения необходимо выделить непровзаимодействовавшие спектаторные нуклоны и объединить наиболее близкие друг к другу в спектаторные фрагменты.



В настоящей работе модели ААМСС-MST [2] и UrQMD [5] использованы для моделирования спектров от  $^{208}\text{Pb}$ — $^{208}\text{Pb}$  столкновений при  $\sqrt{s_{\text{NN}}}=5$  ГэВ в эксперименте MPD на NICA. Эти модели реализуют два принципиально разных описанных выше механизма образования спектров, поэтому целью настоящей работы является сопоставление результатов моделей для дальнейшей их настройки с целью согласования. В отличие от ААМСС-MST, в файлах UrQMD содержатся также частицы из области файерболла. Файлы UrQMD создавались в момент собственного времени  $\tau = 50$  фм/с, которое заведомо превышает время ( $\sim 15$  фм/с) пролета встречного ядра через ядро-мишень. Благодаря меткам, указывающим на невзаимодействующие нуклоны из начальных ядер, спектры были отобраны в отдельные файлы, и к ним был применен алгоритм MST с последующими распадами образовавшихся фрагментов в случае достаточной для этого процесса энергии возбуждения. Таким образом, образующиеся в UrQMD совокупности спектровых нуклонов обрабатываются аналогично ААМСС-MST.

Получившиеся в моделях ААМСС-MST и UrQMD-MST распределения свободных нуклонов по множественности, спектровых фрагментов по заряду, по поперечному импульсу качественно согласуются друг с другом. При этом распределения нуклонов по поперечному импульсу в UrQMD-MST несколько шире, чем в ААМСС-MST.

Вместе с тем хорошо заметны различия распределений, отражающих зависимость от центральности столкновения — прицельного параметра  $b$ . Максимумы множественности свободных нуклонов в UrQMD-MST смещены к большим значениям  $b$ , а общее количество свободных и связанных нуклонов в UrQMD-MST оказалось систематически меньше, чем в ААМСС-MST. На рис. 1 показана причина таких различий: отношение массы спектровых материи к массе начального ядра для заданного  $b$  в UrQMD-MST систематически меньше, чем в ААМСС-MST, которая ранее проверялась путем сравнения ее результатов с данными по выходам свободных спектровых нуклонов в  $^{208}\text{Pb}$ — $^{208}\text{Pb}$  столкновениях при  $\sqrt{s_{\text{NN}}}=5,02$  ТэВ [2]. В дальнейшем планируется сократить до 15 фм/с время, после которого в UrQMD включается MST, или модифицировать критерии выделения спектровых нуклонов, чтобы улучшить согласие между моделями.

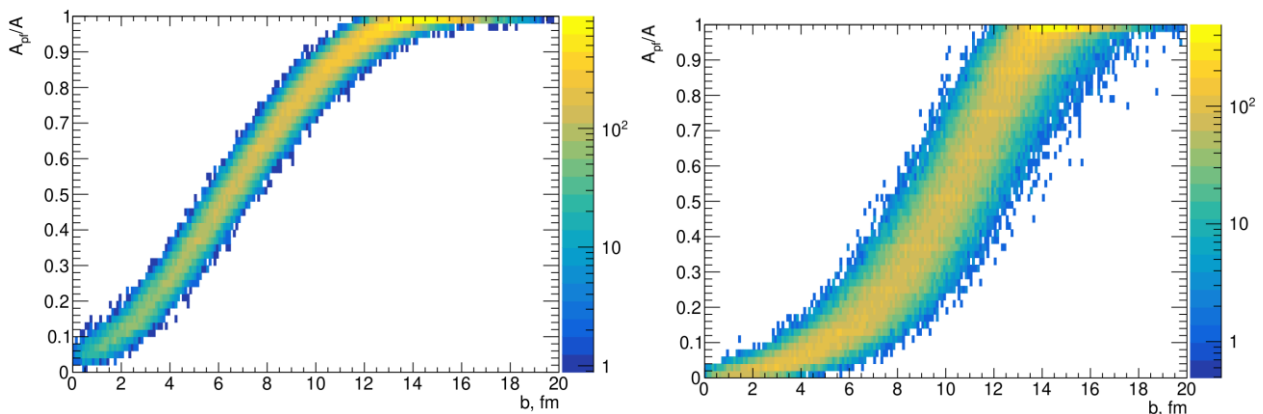


Рис. 1. Отношение массы спектровых материи к массе начального ядра в зависимости от величины прицельного параметра  $^{208}\text{Pb}$ — $^{208}\text{Pb}$  столкновения при  $\sqrt{s_{\text{NN}}}=5$  ГэВ. Слева — моделирование с помощью ААМСС-MST; справа — с помощью UrQMD-MST

Авторы выражают благодарность Олегу Голосову и Петру Парфенову за предоставление ими файлов с результатами моделирования UrQMD.

## Литература

1. *Ivashkin A.* [et al.]. Determination of geometry of heavy ion collisions with forward hadron calorimeter (FHCAL) at MPD/NICA // EPJ Web Conf. 2019. V. 204: 07002.
2. *Nepeivoda R.* [et al.]. Pre-Equilibrium Clustering in Production of Spectator Fragments in Collisions of Relativistic Nuclei // Particles. 2022. V. 5. P. 40–51.
3. *Loizides C., Kamin J., d’Enterria D.* Improved Monte Carlo Glauber predictions at present and future nuclear colliders // Phys. Rev. C. 2018. V. 97: 054910.
4. *Aichelin J.* [et al.]. Quantum molecular dynamics approach to heavy ion collisions: Description of the model, comparison with fragmentation data, and the mechanism of fragment formation // Phys. Rev. C. 1988. V. 37: 2451.
5. *Bass S. A.* [et al.]. Microscopic Models for Ultrarelativistic Heavy Ion Collisions // Prog. Part. Nucl. Phys. 1998. V. 41. P. 225–370.
6. *Светличный А. О., Пшеничников И. А.* Образование свободных и связанных спектровых нуклонов в адронных взаимодействиях релятивистских ядер // Изв. РАН. физ. 2020. Т. 84. № 8. С. 1103–1108.

## Изучение нарушения CP-симметрии в распадах $D^0$ -мезонов в эксперименте CMS

*В. С. Сергейчик<sup>1</sup>, С. М. Поликарпов<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

<sup>3</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Одной из основных задач современной физики элементарных частиц является объяснение нарушения барионной симметрии в нашей Вселенной: преобладания вещества над антивеществом. В 1967 г. А. Д. Сахаров сформулировал [1] три необходимых условия для генерации барионной асимметрии, одним из которых является нарушение CP-инвариантности в распадах адронов. Особый интерес представляет нарушение CP-симметрии в распадах очарованных мезонов, т. е. мезонов, содержащих очарованный кварк. Несколько лет назад коллаборацией LHCb оно было обнаружено [2] в каналах распада  $D^0$ -мезона, частицы, состоящей из очарованного s-кварка и d-кварка. Согласно теоретическим предсказаниям, из многих адронных мод распада  $D^0$ -мезона канал распада  $D^0 \rightarrow K_S^0 K_S^0$  может иметь существенное нарушение, которое относительно легко можно будет проверить на эксперименте [3–7]. LHCb также измерили нарушение в этом распаде [8], однако полученный результат хорошо согласуется с нулем, потому представляет интерес повторить это исследование и уточнить величину CP-нарушения в распаде  $D^0 \rightarrow K_S^0 K_S^0$ .

В настоящей работе представлены результаты по изучению нарушения CP-симметрии в распадах  $D^0$ -мезонов. Данные были взяты из эксперимента CMS на Большом адронном коллайдере. Запись данных происходила в течение 2018 г. Исследовались два канала распада:  $D^0 \rightarrow K_S^0 K_S^0$  и  $D^0 \rightarrow K_S^0 \pi^+ \pi^-$ . Объектом исследования является величина  $\Delta A_{CP}$ :

$$\Delta A_{CP} = \frac{\Gamma(D^0 \rightarrow K_S^0 K_S^0) - \Gamma(\bar{D}^0 \rightarrow K_S^0 K_S^0)}{\Gamma(D^0 \rightarrow K_S^0 K_S^0) + \Gamma(\bar{D}^0 \rightarrow K_S^0 K_S^0)} - \frac{\Gamma(D^0 \rightarrow K_S^0 \pi^+ \pi^-) - \Gamma(\bar{D}^0 \rightarrow K_S^0 \pi^+ \pi^-)}{\Gamma(D^0 \rightarrow K_S^0 \pi^+ \pi^-) + \Gamma(\bar{D}^0 \rightarrow K_S^0 \pi^+ \pi^-)} \quad (1)$$

здесь  $\Gamma$  — ширина распада  $D^0$ -мезона. Чтобы восстановить аромат  $D^0$ , накладывается еще одно требование:  $D^0$ -мезоны должны получаться из распада  $D^{*\pm}(2010) \rightarrow D^0(\bar{D}^0) \pi^\pm$ . Таким образом, по заряду пиона можно определять, какая странность у распада:  $C=+1$  (если у пиона положительный заряд) или  $C=-1$  (если у пиона отрицательный заряд). Рассмотрение разницы позволяет избавиться от систематических неопределенностей, вызванных трудностями с измерением эффективности реконструкции  $D^{*\pm}(2010)$  и измерением сечения рождения  $D^0$  в распаде  $D^{*\pm}(2010) \rightarrow D^0(\bar{D}^0) \pi^\pm$  и перейти сразу к рассмотрению величины, зависящей только от количества сигнальных событий. Таким образом, величина  $\Delta A_{CP}$  будет равна разнице:

$$\Delta A_{CP} = A_{CP}^{raw}(D^0 \rightarrow K_S^0 K_S^0) - A_{CP}^{raw}(D^0 \rightarrow K_S^0 \pi^+ \pi^-), \quad (2)$$

$$A_{CP}^{raw}(D^0 \rightarrow K_S^0 K_S^0) = \frac{N(D^{*+}(2010) \rightarrow D^0 \pi^+ \rightarrow K_S^0 K_S^0 \pi^+) - N(D^{*-}(2010) \rightarrow \bar{D}^0 \pi^- \rightarrow K_S^0 K_S^0 \pi^-)}{N(D^{*+}(2010) \rightarrow D^0 \pi^+ \rightarrow K_S^0 K_S^0 \pi^+) + N(D^{*-}(2010) \rightarrow \bar{D}^0 \pi^- \rightarrow K_S^0 K_S^0 \pi^-)}, \quad (3)$$

$$A_{CP}^{raw}(D^0 \rightarrow K_S^0 \pi^+ \pi^-) = \frac{N(D^{*+}(2010) \rightarrow D^0 \pi^+ \rightarrow K_S^0 \pi^+ \pi^- \pi^+) - N(D^{*-}(2010) \rightarrow \bar{D}^0 \pi^- \rightarrow K_S^0 \pi^+ \pi^- \pi^-)}{N(D^{*+}(2010) \rightarrow D^0 \pi^+ \rightarrow K_S^0 \pi^+ \pi^- \pi^+) + N(D^{*-}(2010) \rightarrow \bar{D}^0 \pi^- \rightarrow K_S^0 \pi^+ \pi^- \pi^-)}. \quad (4)$$

Критерии отбора были оптимизированы 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.

На рис. 1 изображены распределения инвариантной массы  $D^*$  в каналах  $K_S^0 \pi \pi$  и в  $K_S^0 K_S^0$ . Во втором канале событий меньше, поскольку этот распад достаточно редкий [9], поэтому данные аппроксимировались двумерным распределением: по одной оси откладывалась инвариантная масса продуктов распада  $D^*$ , а по второй —  $D^0$ ; на рисунке изображена проекция этого распределения на ось инвариантной массы продуктов распада  $D^*$ .

Получившееся число сигнальных событий в канале  $D^0 \rightarrow K_S^0 K_S^0$ :  $1577 \pm 52$ , а в канале  $D^0 \rightarrow K_S^0 \pi^+ \pi^-$ :  $1472600 \pm 4330$ . Относительные погрешности, соответственно, 3,29% и 0,29%.

В результате этого исследования было получено достаточно точное описание формы сигнала, а также достаточно точная оценка сигнальных событий в обоих каналах, что поможет в ходе дальнейшего уточнения величины  $\Delta A_{CP}$ .

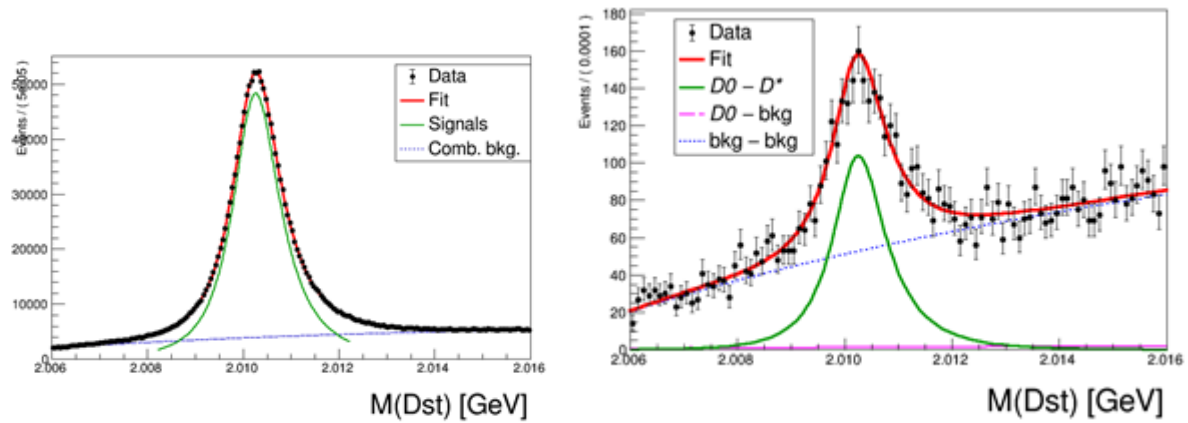


Рис. 1. Распределения инвариантных масс продуктов распада  $D^*$  в канале  $D^0 \rightarrow K_S^0 \pi^+ \pi^-$  (слева) и проекция двумерной аппроксимации инвариантной массы продуктов распада  $D^*$  и  $D^0$  на ось  $m(D^*)$  в канале  $D^0 \rightarrow K_S^0 K_S^0$  (справа)

### Литература

1. Сахаров А. Д. Нарушение CP-инвариантности. C-асимметрия и барионная асимметрия Вселенной // Письма в ЖЭТФ. 1967. Т. 5. С. 32–35.
2. Aaij R. [et al., LHCb collaboration]. Observation of CP violation in charm decays // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122: 211803.
3. Nierste U., Schacht S. CP violation in  $D^0 \rightarrow K^0 S^0 K^0 S^0$  // Phys. Rev. D. 2015. V. 92: 054036.
4. Li H.-N., Lu C.-D., Yu F.-S. Branching ratios and direct CP asymmetries in  $D \rightarrow P P$  decays // Phys. Rev. D. 2012. V. 86: 036012.
5. Cheng H.-Y., Chiang C.-W. Revisiting CP violation in  $D \rightarrow PP$  and  $VP$  decays, Phys. Rev. D. 2019. V. 100: 093002.
6. Buccella F., Paul A., Santorelli P. SU(3)<sub>F</sub> breaking through final state interactions and CP asymmetries in  $D \rightarrow P P$  decays // Phys. Rev. D. 2019. V. 99: 113001.
7. Brod J., Kagan A. L., Zupan J. Size of direct CP violation in singly Cabibbosuppressed D decays // Phys. Rev. D. 2012. V. 86: 014023.
8. Collaboration, LHCb. Measurement of CP asymmetry in  $D^0 K^0 S^0 K^0 S^0$  decays // Physical Review D. 2021. V. 104: 031102.
9. Zyla P. A. [et al., Particle Data Group] Review of Particle Physics // Prog. Theor. Exp. Phys. 2020. V. 2020: 083C01.

УДК 524.1

## Измерение темпов счета межэтажных совпадений на Байкальском нейтринном телескопе Baikal-GVD

Б. Б. Ульзутуев

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

Атмосферные мюоны, рождающиеся в ШАЛ, являются существенной компонентой фонового сигнала в нейтринных телескопах. Измерения потока атмосферных мюонов различными методами проводились на ряде нейтринных телескопов, в частности, на NT-36 (предшественнике Baikal-GVD) [1], ANTARES [2] и IceCube [3]. Цель данной работы — измерение темпов счета межэтажных совпадений на Байкальском нейтринном телескопе Baikal-GVD, что является важным промежуточным этапом на пути к измерению потока атмосферных мюонов. Принцип работы Baikal-GVD заключается в регистрации фотонов черенковского излучения и электромагнитных ливней, вызванных прохождением мюонов сквозь воду. Фотоны регистрируются при помощи оптических модулей (ОМ) — ФЭУ, заключенных в герметичную стеклянную сферу с пониженным содержанием радиоактивных изотопов и оснащенных вспомогательной электроникой. Конструктивно ОМ объединены в секции по 12 штук и закрепляются под водой на нержавеющей стальном тросе. Три секции, расположенные на одном тросе, образуют гирлянду. Восемь гирлянд, одна в центре и семь в вершинах правильного семиугольника, образуют кластер — субъединицу Baikal-GVD, способную полноценно работать в качестве нейтринного детектора независимо от других кластеров. Радиус кластера составляет 60 м, глубина местоположения ОМ от 750 до 1270 м. На 2019 г. было введено в строй 5 кластеров, на 2022 г. — 10.

Этаж — это слой оптических модулей, расположенных на одной глубине, расстояние между этажами равно 15 м. Основная идея метода межэтажных совпадений заключается в том, что мюоны вызывают коррелированные во времени сигналы на соседних по вертикали оптических модулях. Если построить распределение по разнице времен срабатывания ОМ на верхнем и нижнем этажах после отбора сигналов в паре по амплитуде (рис. 1), то можно увидеть сигнальный пик и плато случайных шумовых совпадений. Вычитанием плато вкуче с амплитудным отбором возможно в значительной мере подавить шумовые сигналы, происходящие от хемилюминесценции и темнового тока ФЭУ. На рис. 2 представлены результаты измерений темпов счета межэтажных совпадений от номера межэтажной пары ОМ для кластера 1 за март–май 2019 г. в сравнении с данными моделирования телескопа методом Монте-Карло. Нулевые темпы счета соответствуют парам с неисправными ОМ. Статистические погрешности пренебрежимо малы, основной вклад в невязку экспериментальных данных относительно Монте-Карло дает разброс характеристик ОМ. Несмотря на это, экспериментальные данные в пределах систематических ошибок находятся в согласии с моделированием.

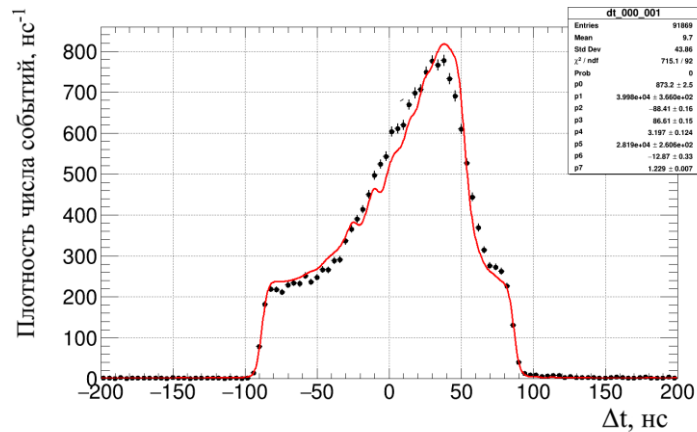


Рис. 1. Распределение по разнице времен срабатывания ОМ-каналов 0 и 1 первого кластера, черные точки — экспериментальные данные за март–май 2019 г., красная линия — аппроксимация суммой плато случайных шумовых совпадений и распределения Монте-Карло

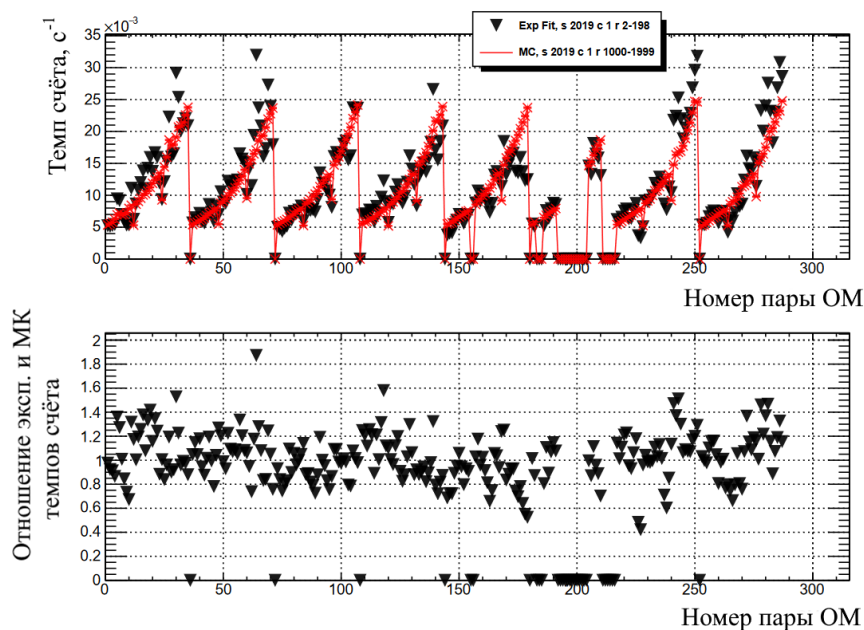


Рис. 2. *Вверху*: зависимость темпа счета межэтажных совпадений от номера пары ОМ. Черные треугольники — экспериментальные данные, красные кресты — данные МК. *Внизу*: отношение экспериментального и МК темпов счета

В дальнейшем планируется использовать полученные результаты для измерения потока атмосферных мюонов следующим образом:

$$\dot{N}(h) = J_{\mu}(h) \cdot S_{\text{eff}}(h). \quad (1)$$

Темп счета  $\dot{N}$  пропорционален интегральному потоку атмосферных мюонов  $J_\mu$  (1). Коэффициент пропорциональности  $S_{\text{eff}}$  имеет смысл эффективной площади межэтажной пары ОМ. Из монте-карловского моделирования возможно рассчитать эффективную площадь в зависимости от глубины и, соответственно, найти поток атмосферных мюонов из экспериментально измеренных темпов счета межэтажных совпадений.

### Литература

1. *Belolaptikov I. A.* [et al.] The Baikal underwater neutrino telescope: Design, performance, and first results // *Astropart. Phys.* 1997. V. 7. P. 263–282.
2. *Aguilar J. A.* [et al.] Measurement of the atmospheric muon flux with a 4 GeV threshold in the ANTARES neutrino telescope // *Astropart. Phys.* 2010. V. 33. P. 86–90.
3. *Aartsen M. G.* [et al.] Characterization of the atmospheric muon flux in IceCube // *Astropart. Phys.* 2016. V. 78(2): 1–27.

У ДК 539.1.08

## Результаты и планы эксперимента NA64е в ЦЕРН

*И. В. Тлисова*

Институт ядерных исследований РАН

Установка NA64 в ЦЕРНе предназначена для поиска частиц легкой темной материи (ЛТМ) и частиц-медиаторов к скрытому сектору с массой от 1 кэВ до 1 ГэВ.

Известно, что темная материя взаимодействует с нашим веществом слабо, в основном посредством гравитации, поэтому судить о ее дополнительных свойствах и взаимодействиях приходится по косвенным признакам — нестыковкам в экспериментах и аномалиям в наблюдениях. Строятся различные гипотезы, в которых пытаются объяснить эти необычные факты. Одна из гипотез предполагает существование легкого темного бозона.

Гипотетический бозон  $A'$  может рождаться в реакции упругого рассеяния высокоэнергетичных электронов на ядрах активной мишени аналогично тормозным фотонам:  $eZ \rightarrow eZA'$  с последующим его быстрым распадом  $A' \rightarrow \chi\chi'$  на частицы ЛТМ; диаграмма процесса изображена на рис. 1. Поиск основан на методе потерянной энергии, которая уносится недетектируемыми частицами  $\chi$ . Мишень представляет собой активный поглотитель (beam-dump) — электромагнитный калориметр (ECAL), способный полностью поглотить энергию падающих электронов с энергетическим разрешением  $\sigma E/E \simeq 10\%/\sqrt{E(\text{ГэВ})} + 1\%$ . Калориметр представляет собой матрицу размером  $5 \times 6$  независимых счетчиков, каждый из которых состоит из 150 чередующихся пластин свинца толщиной 1,5 мм и пластикового сцинтиллятора толщиной 1,5 мм и имеет полную длину около  $40 X_0$  (радиационных длин). Детектор также разделен на предливневую часть длиной  $4 X_0$  и основную часть — поглотитель толщиной  $36 X_0$ .

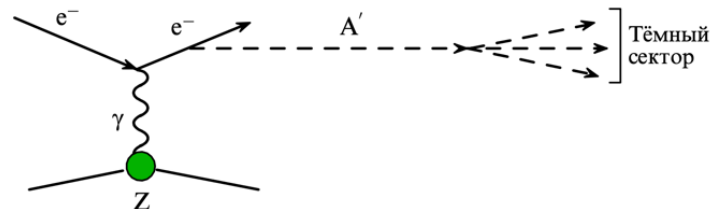


Рис. 1. Диаграмма, иллюстрирующая рождение массивного тормозного  $A'$ -бозона в реакции  $eZ \rightarrow eZA'$  с последующим невидимым распадом  $A'$ .

Для обеспечения герметичности установки за электромагнитным калориметром установлен массивный адронный калориметр (HCAL). Между калориметрами ECAL и HCAL размещается высокоэффективный детектор из пластикового сцинтиллятора (VETO) для идентификации событий с такими проникающими заряженными частицами. Одним из источников фоновых событий является наличие остаточных (порядка 1%) примесей адронов в первичном пучке. Чтобы подавить этот фон, до электромагнит-

ного калориметра установлена система мечения электронов пучка на основе регистрации их синхротронного излучения (SRD) [1]. Установка NA64e также включает в себя магнитный спектрометр для измерения импульса частиц. Он состоит из двух последовательных дипольных магнитов и набора трековых детекторов — типа «Micromegas» (MM), «Straw Tubes» (ST) и газовых электронных умножителей (GEM). Кроме того, имеется набор счетчиков на основе пластикового сцинтиллятора для регистрации пучка. Во время работы установки большинство первичных электронов порождают в калориметре электромагнитный ливень, вся энергия которого регистрируется установкой. Для снижения скорости счета рожденных событий, записываемых на диск, используется триггер — совпадение сигналов от сцинтилляционных счетчиков (SC) и ECAL о превышении порога энерговыделения в электромагнитном калориметре.

После применения всех критериев отбора в сигнальной области, определяемой двумя условиями  $E_{ECAL} < 50 \text{ ГэВ}$  и  $E_{HCAL} < 1 \text{ ГэВ}$ , событий — кандидатов на роль темной материи — зарегистрировано не было. Результат совместим с оценкой уровня фоновых событий ( $0,53 \pm 0,17$ ), который в основном определяется взаимодействием электронов с элементами установки выше по пучку от электромагнитного калориметра и одиночными адронами под большими углами, не попадающими в установку. Этот экспериментальный результат использовался для установки предела на рождение темного фотона ( $A'$ ) в невидимой моде распада [2]. При этом эффективность регистрации событий с темным фотоном определялась с помощью программы полного моделирования установки на основе GEANT4 и совместимого с ним пакета для моделирования рождения частиц темной материи DMG4 [3].

Одним из первых результатов NA64 было исключение объяснения (g-2) аномалии за счет темного фотона.

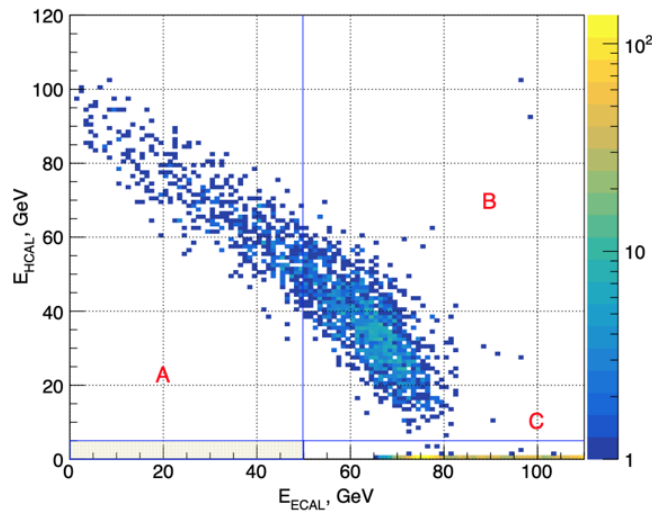


Рис. 2. Распределение в плоскости  $E_{ECAL}$ – $E_{HCAL}$  по энергии событий, оставшихся после применения всех критериев отбора для данных, полученных в сеансе 2022 г.

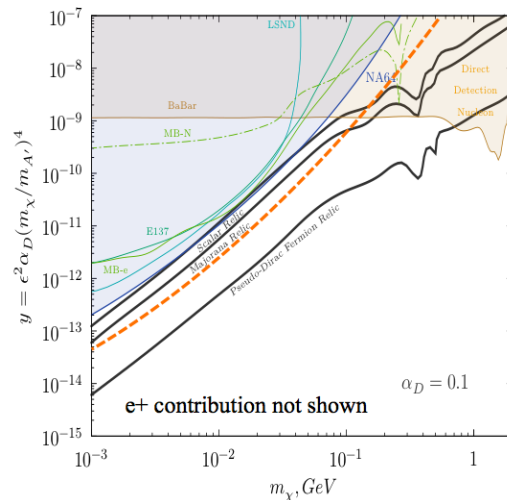


Рис. 3. Чувствительность (штриховая кривая) эксперимента NA64 к легкой темной материи с учетом статистики, набранной в 2022 г.

В результате сеанса на канале H4 в течение августа–октября 2022 г. было набрано около  $6 \cdot 10^{11}$  электронов на мишени. Предварительные результаты анализа выборки объемом около 15% данных, показанные на рис. 2, свидетельствуют об их хорошем качестве и отсутствии фона. Это позволяет планировать последующие новые поиски с набором существенно большего объема данных, превышающего  $10^{12}$  электронов на мишени, с целью впервые проникнуть в неисследованную область параметров моделей легкой материи, показанную на рис. 3. В свою очередь, это должно помочь подтвердить (в случае обнаружения) или закрыть некоторые из популярных моделей так называемой термальной темной материи.

В эксперименте NA64 проводятся также поиски других слабозаимодействующих частиц (FIP) и редких процессов, выходящих за рамки Стандартной модели.

### Литература

1. *Depero E.* [et al.]. High purity 100 GeV electron identification with synchrotron radiation // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A. 2017. V. 866. P. 196–201.
2. *Andreev Yu. M.* [et al.]. Improved exclusion limit for light dark matter from  $e+e-$  annihilation in NA64 // Phys. Rev. D. 2021. V. 104: L091701.
3. *Bondy M.* [et al.]. Fully Geant4 compatible package for the simulation of Dark Matter in fixed target experiments // Comput. Phys. Commun. 2021. V. 269: 108129.

УДК 539.120.7

## Оценка эффективности определения заряда частиц в ближнем детекторе ND280 нейтринного эксперимента T2K

*Д. В. Федорова*

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

Проект T2K [1, 2] — ускорительный эксперимент с длинной базой, основной задачей которого является прецизионное измерение параметров осцилляций нейтрино. В состав T2K входит ускорительный комплекс J-PARC, ближний нейтринный детектор ND280 и дальний Черенковский детектор Super-Kamiokande.

Цель представляемой работы — оценка эффективности восстановления знака заряда частиц и связанной с этим систематической ошибки измерений нейтринных взаимодействий в детекторе ND280 [3]. Использовались данные трех газовых времяпроекционных камер TPC, разделенных детекторами POD (детектор  $\pi^0$ , сцинтиллятор + поглотитель), FGD1 и FGD2 (пластиковые сцинтилляционные детекторы) (рис. 1). Рассматривались треки частиц, пересекающие несколько детекторов.

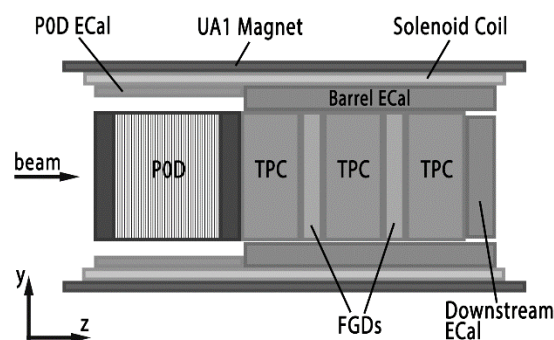


Рис. 1. Схема детектора ND280

В случае реальных данных эксперимента истинный заряд частицы неизвестен, поэтому изучались вероятности восстановления одного/разных знаков заряда для различных комбинаций субдетекторов, составляющих общий, глобальный трек частицы в ND280. Было выполнено сравнение характеристик исследуемых величин для реальных данных и результатов моделирования, величина расхождения вместе с

соответствующими ошибками будет использована для оценки искомой систематической ошибки при анализе данных ND280 T2K в 2023–2024 гг.

## Литература

1. Abe K. [et al.]. The T2K experiment // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A. 2011. V. 659(1). P. 106–135.
2. Abe K. [et al.]. Constraint on the matter–antimatter symmetry-violating phase in neutrino oscillations // Nature. 2020. V. 580(7803). P. 339–344.
3. TN-229. ND280 global charge identification / F. Sanchez // T2K Internal Technical Note, May 2016.

УДК 550.348.43, 539.16

## Исследование корреляций низкоэнергетического фона нейтринного эксперимента LVD с различными геоэффектами

Н. А. Филимонова<sup>1,2</sup>, Н. Ю. Агафонова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт ядерных исследований РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В работе представлен анализ экспериментальных данных, полученных Детектором большого объема (Large Volume Detector, LVD), находящимся в лаборатории Гран-Сассо. Детектор LVD регистрирует низкоэнергетичный фон от 0,5 МэВ до 20 МэВ, основная часть которого — это распады от дочерних ядер радона. Изучается влияние на эманацию радона различных локальных эффектов: температуры, влажности, давления, а также связь с сейсмической активностью, форбуш-эффектами, сильными грозовыми штормами и приливными силами с 2016 по 2019 гг.

Детектор большого объема 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.

Главная задача LVD — регистрация нейтринных всплесков от коллапсирующих звезд [1]. 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 мюонные и тау-нейтрино и антинейтрино (реакция на углероде 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 30 лет работы (1992–2022), получено экспериментальное ограничение на частоту нейтринных всплесков от гравитационных коллапсов звезд в Галактике: менее 1 события за 13,03 г. на 90% уровне достоверности [2].

Фоном детектора LVD являются атмосферные мюоны и естественная радиоактивность под землей. Изменения низкоэнергетического фона ( $E > 0,5$  МэВ) под землей 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 счет бета-распада превращающимися в полоний с характерным временем 19,7 мин. Энергетический спектр гамма-излучения охватывает диапазон от 0,6 до 2,5 МэВ [3].

В поведении фона были найдены составляющие сезонной вариации (фаза которой приходится на начало сентября), недельные и суточные 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.

Проведен анализ данных темпа счета установки с 2016 по 2019 гг. Собраны базы по землетрясениям, грозам, лунным циклам и форбуш-эффектам за тот же период времени. Проведен первичный корреляционный анализ методом Пирсона. Результаты показывают отсутствие корреляции с грозами, лунными циклами и форбуш-эффектами. Проводятся исследования корреляций фоновых событий LVD с землетрясениями разной мощности и расстояния от детектора, учитываются периоды в данных с различными схемами работы вентиляции в помещении и техническими работами служб обслуживания экспериментов.

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке по гранту Российского научного фонда № 23-22-00048.

### Литература

1. *Bari G.* [et al.]. LVD at Gran Sasso // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 1988. V. 264. P. 5–17.
2. *Agafonova N. Yu.* [et al.]. LVD Experiment: 25 Years of Operation // Phys. Atom. Nucl. 2015. V. 81. P. 95–104.
3. *Агафонова Н. Ю.* [и др.] Изучение вариаций концентрации радона под землей с помощью установки LVD. Препринт № 1071/2001. — М.: ИЯИ РАН, 2001.

УДК: 539.121.667

## Генерация показаний наземного детектора эксперимента Telescope array и поиск аномалий с помощью нейронных сетей

*Р. Р. Фитагдинов*

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

Основной целью данной работы было разработать модели для генерации показаний поверхностного детектора с наибольшей амплитудой для эксперимента Telescope Array с помощью нейронных сетей. Данные, используемые для обучения модели, были получены с помощью метода Монте-Карло. Для достижения данной цели были написаны генеративно-состязательные сети Васерштейна с градиентным штрафом.

Были получены визуально похожие данные. Была написана функция поиска аномалий, которая позволила не только искать расхождения реальных и смоделированных данных, но и воспроизводить данные, близкие к заданным. Задачами дальнейших исследований могут стать написание генеративно-состязательной сети для всех поверхностных детекторов, а не только для детектора с наибольшей амплитудой сигнала. Таким образом, эта модель может быть хорошей альтернативой методу Монте-Карло, который сейчас применяется. Ее преимуществом перед ним может служить скорость, которая отличается на несколько порядков.

Обсерватория эксперимента Telescope Array включает в себя 507 сцинтилляционных поверхностных детекторов. Они занимают площадь около 700 кв. км. Каждый детектор содержит два слоя сцинтиллятора толщиной 1,2 см.

Данные, используемые в работе, получены были методом Монте Карло. В данной работе мы построили генеративно-состязательную нейронную сеть для генерации показаний наиболее активного детектора. Данные имели размер (472351, 128, 2) где 2 отвечает за два слоя наземного детектора, 128 — количество бинов, на которые разбит сигнал, продолжительностью 20 нс. Данные были отнормированы так, чтобы показания были в интервале от 0 до 1. На рис. 1 представлен пример показания детектора. Синим и красным изображены показания 1-го и 2-го слоя детектора соответственно.

Для генерации данных использовались генеративно-состязательные сети Васерштейна с градиентным штрафом. Сеть состоит из двух нейронных сетей, называемыми генератором и критиком. Генератор принимает на вход шум и производит из них реалистичные данные, а критик пытается сказать, насколько они похожи на реальные. Таким образом, их обучение происходит посредством соперничества друг с другом. В качестве ошибки используется второе расстояние Васерштейна.

Критик состоит из 5 слоев сверточных двумерных сетей с ядром (5, 2). После каждого сверточного слоя идет слой MaxPooling, обеспечивающий понижение размерности. Критик имеет 150 000 обучаемых параметров.

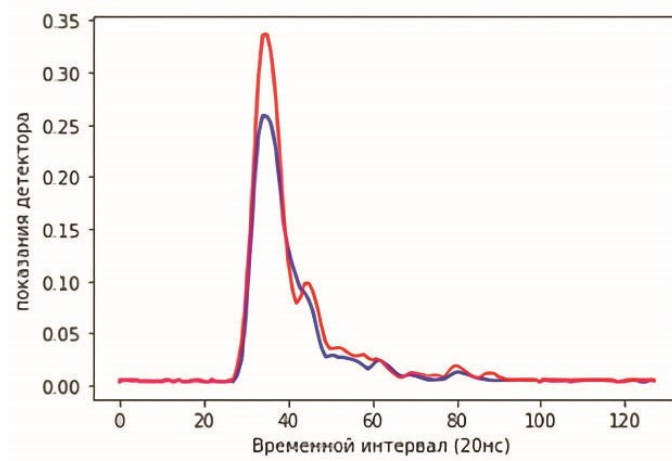


Рис. 1. Пример сигнала наиболее активного детектора

Генератор принимает на вход шум размером 200 из нормального распределения. Генератор состоит из 4 сверточных транспонированных сетей с ядром (5,2). Он имеет около 200 000 обучаемых параметров. Пример результатов можно видеть на рис. 2.

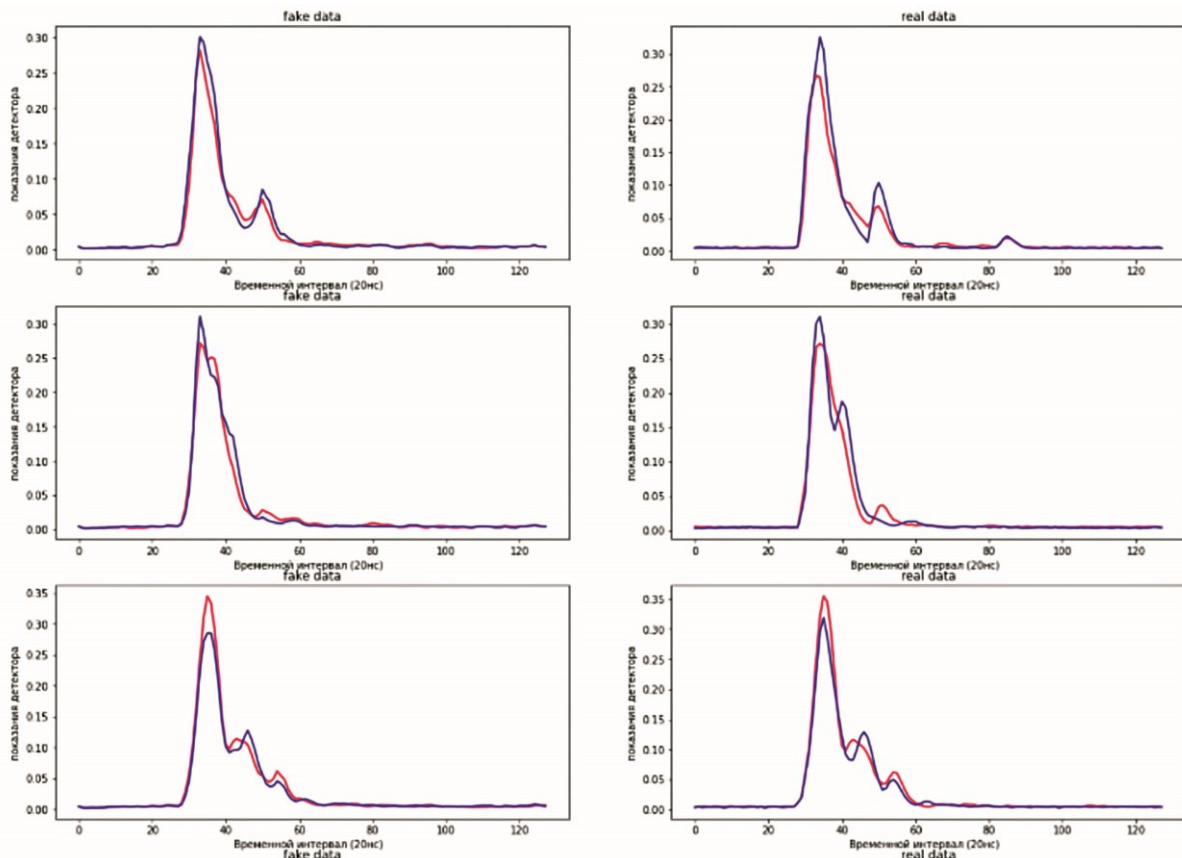


Рис. 2. Пример сгенерированных (слева) и реальных (справа) данных

Для поиска аномалий был написан алгоритм, получающий на вход изображение и подбирающий шум для генератора посредством градиентного спуска для функции ошибки. Ошибка состояла из двух частей:

- 1) сначала рассчитывалась разница показаний реальных и сгенерированных данных. Позже подсчитывалась сумма всех элементов полученной матрицы;
- 2) разница показаний дискриминатора для реальных и сгенерированных данных. Эта ошибка имела вес 0,001.

В связи с улучшением качества генерации данных визуально стало тяжело различать качество моделей. В связи с этим была взята в качестве меры ошибка, описанная выше. Таким образом, лучшая

модель имела наименьшую меру, т. е. выдавала наиболее реалистичные данные. Благодаря этому способу появилась возможность не только визуально, но и качественно оценивать модели.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-20063.

УДК 539.1.05

## Статус поиска дефицита электронных нейтрино в ближнем детекторе ND280 эксперимента T2K

*А. С. Шварцман*

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

Результаты экспериментов по изучению нейтринных осцилляций достоверно описываются Стандартной моделью с тремя нейтрино. Однако существуют аномалии, такие как реакторные антинейтринные аномалии [1], галлиевые аномалии [2] и дефицит электронных нейтрино в экспериментах с короткой базой [3], которые не могут быть объяснены этой моделью и могут свидетельствовать о существовании дополнительных нейтринных состояний — стерильных нейтрино. Эксперимент T2K [4], направленный на изучение нейтринных осцилляций, также может обнаружить стерильные нейтрино [5]. Осцилляции электронных нейтрино в стерильные на короткой дистанции (280 м) могут быть определены по количеству наблюдаемых событий в ближнем детекторе ND280. Главной задачей для обнаружения стерильных нейтрино в ND280 является снижение фона от нейтринных взаимодействий.

В данной работе рассмотрены события взаимодействий электронных нейтрино с веществом. Приведен статус поиска стерильных нейтрино для следующих параметров в модели 3+1: квадрат разницы масс  $\Delta m_{\text{eff}}^2$  в пределах от 1 до 10 эВ<sup>2</sup>, угол смешивания  $\sin^2 \theta_{\text{eff}}$  в пределах от 0 до 1.

### Литература

1. *Mention G., Fechner M., Lasserre Th.* [et al.]. Reactor antineutrino anomaly // *Phys. Rev. D.* 2011. V. 83: 073006.
2. *Kostensalo J., Suhonen J., Giunti C., Srivastava P. C.* The gallium anomaly revisited // *Phys. Lett. B.* 2019. V. 795. P. 542–547.
3. *Babu K. S., Brdar V., Gouvêa A., Machado P. A. N.* Addressing the Short-Baseline Neutrino Anomalies with Energy-Dependent Mixing Parameters // *Phys. Rev. D.* 2023. V. 107: 015017.
4. *Abe K.* [et al.]. The T2K experiment // *Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A.* 2011. V. 659(1). P. 106–135.
5. *Abe K.* [et al.]. Search for short baseline  $\nu_e$  disappearance with the T2K near detector // *Phys. Rev. D.* 2015. V. 91: 051102(R).

УДК 539.129

## Эксперимент NA64mu в ЦЕРН

*Д. А. Шукин*

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Со времени появления первых свидетельств существования Темной материи (ТМ) в 1930-х гг., одной из главных задач физики частиц является изучение свойств ТМ. Несмотря на обилие экспериментов по ее изучению, структура ТМ все еще плохо изучена. Существуют строгие экспериментальные ограничения на модели ТМ, однако допустимые массы частиц-кандидатов в ТМ все еще имеют большой разброс значений. В целом предполагается, что частицы темного сектора взаимодействуют с частицами СМ только посредством гравитации, но существует класс моделей, в которых такое взаимодействие может осуществляться при помощи новых массивных частиц в диапазоне масс  $\sim 1$  ГэВ [1, 2].

Одна из таких гипотетических частиц — векторный бозон  $A'$  (темный фотон). Такая частица может иметь массу менее 1 ГэВ и иметь константу связи с фотоном Стандартной модели (СМ). Кроме того, отклонения от теории в измерениях магнитного момента мюона на уровне  $3,6\sigma$  дают дополнительные основания для поиска частиц новой физики.

В эксперименте NA64mu будет исследована модель с векторным бозоном  $Z_\mu$ , который может имеет константу связи с мюонами СМ. Для поиска таких гипотетических частиц используется пучок мюонов на ускорителе SPS в ЦЕРН с энергией 100÷160 ГэВ. Если такой бозон существует, то рождение можно наблюдать в реакции рассеяния мюонов пучка на ядрах активной мишени:

$$\mu + Z \rightarrow \mu + Z + Z_\mu . \quad (1)$$

Методика эксперимента NA64mu основана на результатах и методах эксперимента NA64e по поиску невидимых распадов  $A'$  и скалярных/псевдоскалярных мезонов на ускорителе SPS в ЦЕРН и дополняет исследования в эксперименте NA64e. В простейшем случае взаимодействие  $Z_\mu$  бозона с частицами СМ аналогично взаимодействию фотонов и мюонов, при этом в лагранжиан вносится поправка вида:

$$L_{Z_\mu} = e_\mu \bar{\mu} \gamma_\nu \mu Z_\mu^\nu . \quad (2)$$

В дальнейшем, в зависимости от свойств и массы  $Z_\mu$  бозона, возможен его невидимый распад на частицы темного сектора, не детектируемые экспериментально, или в случае  $M_{Z_\mu} > 2m_\mu$  — распад на мюонную пару. В первом случае в экспериментальной установке будут наблюдаться события со значительной недостающей энергией, во втором — события с парными лептонами в конечном состоянии.

Установка эксперимента NA64mu (рис. 1) [1] состоит из нескольких ключевых детекторов: два магнитных спектрометра для определения параметров мюонов на входе и на выходе из установки; системы триггерных и вето-счетчиков; активной мишени, совмещенной с электромагнитным калориметром; адронного калориметра на выходе из установки для детектирования фоновых событий при взаимодействии мюонов пучка с веществом мишени.

При рождении  $Z_\mu$  во взаимодействиях мюонов пучка с веществом мишени энергия пучка будет распределена между рассеянным мюоном (детектируется магнитным спектрометром дальше по ходу пучка, относительно мишени) и рожденным  $Z_\mu$ . В результате быстрого распада  $Z_\mu$  на недетектируемые частицы в установке будет обнаружена недостающая энергия вместе с «нулевым» энерговыделением в остальной части установки [1]. Под «нулевым» понимается типичное для мюонов пучка энерговыделение, при условии прохождения мюона через установку без взаимодействия с мишенью, а именно, энерговыделение в калориметрах, соответствующее минимально ионизирующей частице, отсутствие энерговыделения в вето-системе и ограничение на суммарное энерговыделение.

В 2021 г. (тестовый период) и в 2022 г. в эксперименте NA64mu была набрана статистика на уровне  $5 \cdot 10^9$  и  $4 \cdot 10^{10}$  событий с взаимодействием мюона в мишени соответственно. При обработке данных 2022 г. не было обнаружено сигнальных событий. Анализ данных 2022 г. в настоящее время продолжается. Эксперимент NA64mu продолжит набор данных в 2023 г., запланирована оптимизация триггерной системы и системы сбора данных, модернизация электроники для работы в условиях высокой интенсивности.

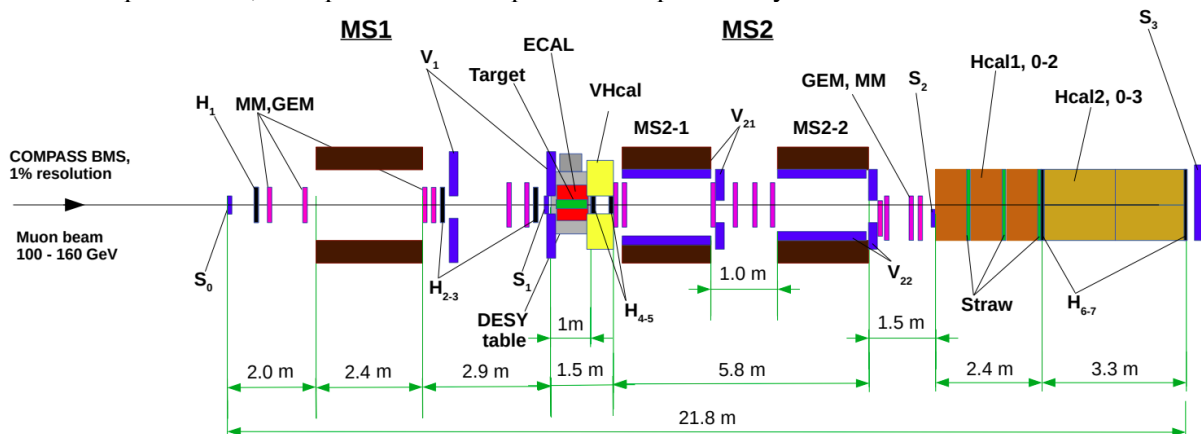


Рис. 1. Принципиальная схема установки эксперимента NA64mu

## Литература

1. *Banerjee D.* [et al.]. Proposal for an experiment to search for dark sector particles weakly coupled to muon at the SPS. CERN-SPSC-2019-002.
2. *Gninenko S.N., Kirpichnikov D.V., Kirsanov M.M., Krasnikov N.V.* Combined search for light dark matter with electron and muon beams at NA64 // Phys. Lett. B. 2019. V. 796. P. 117–122.

Измерение абсолютных вероятностей распадов  $B_s \rightarrow D_{(s)}$  в эксперименте Belle

М. И. Ясавеев

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Измерение параметров  $B_s$ -мезонов позволяет проводить проверку предсказаний Стандартной модели, а также осуществлять поиск Новой физики за ее пределами [1–3]. Одной из возможностей для исследования  $B_s$  являются  $e^+e^-$ -коллайдеры с энергией в системе центра масс, равной энергии покоя  $\Upsilon(5S)$  резонанса. Вероятность распада  $\Upsilon(5S)$  на пару  $B_s$  рассчитывается при помощи вероятности инклюзивного распада  $B_s$  в  $D_s$ . Из-за низкой экспериментальной точности измерения данной вероятности при вычислениях долгое время использовалась теоретическая оценка  $(92 \pm 8)\%$  [4], однако новый результат прямого измерения оказался примерно в 1,5 раза меньше —  $(60,2 \pm 5,8 \pm 2,3)\%$  [5].

Основной мотивацией исследования является проверка нового результата эксперимента Belle, а также осуществление первого прямого измерения вероятностей двух других инклюзивных каналов. Для измерения абсолютной вероятности распада  $B_s \rightarrow D_s X$  используется образец данных эксперимента Belle, набранный в области  $\Upsilon(5S)$ -резонанса с интегральной светимостью  $121 \text{ фб}^{-1}$ . Идея измерения состоит в полном восстановлении одного  $B_s$ -мезона в большом количестве адронных каналов и последующем восстановлении  $D_s$ -мезона в остатке события. Метод адронного тагирования позволил улучшить разрешение и понизить фон по сравнению с последним измерением.

Для восстановления  $B_s$ -мезона в большом количестве адронных каналов было разработано необходимое программное обеспечение. Использовался метод машинного обучения, классификатор, который позволял сравнивать  $B_s$ -кандидаты из разных каналов и оставлять только одного кандидата на  $\Upsilon(5S)$ -событие. В результате было восстановлено  $11014 \pm 452$   $B_s$ -кандидатов в 15 каналах (рис. 1). Для определения числа сигнальных пар  $B_s$ - $D_s$  проводился фит двумерного распределения, по одной оси которого откладывалась масса тагирующего  $B_s$ , а по другой — масса  $D_s$ , восстановленного в остатке  $B_s$ .

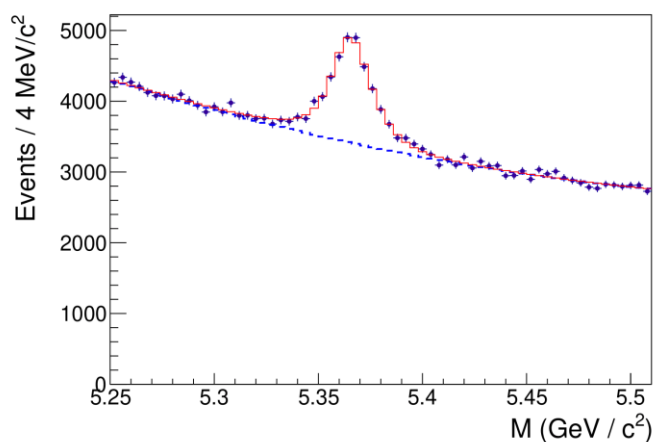


Рис. 1. Распределение по инвариантной массе восстановленного  $B_s$  в образце данных с большой светимостью, набранном при энергии  $\Upsilon(5S)$ -резонанса в эксперименте Belle

Таким образом, неожиданный результат эксперимента Belle был подтвержден, а также впервые измерены вероятности распадов  $B_s$  на  $D^0$  и  $D^+$ .

## Литература

1. Falk A. F. Flavor physics and the CKM matrix: An Overview // Nucl. Phys. B. Proc. Suppl. 2002. V. 111(1–3). P. 3–13.
2. Atwood D., Soni A. Using imprecise tags of CP eigenstates in  $B_s$  and the determination of the CKM phase  $\gamma$  // Phys. Lett. B. 2002. V. 533(1–2). P. 37–42.
3. Bobeth C., Buras A. J. Searching for New Physics with  $\mathcal{B}(B_{\{s,d\}} \rightarrow \mu\bar{\mu})/\Delta M_{\{s,d\}}$  // Acta Phys. Pol. B. 2021. V. 52: 1189.
4. Artuso M. [et al.]. [CLEO] Evidence for  $B_s\bar{B}_s$  production at the  $\Upsilon(5S)$  resonance // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95: 261801.
5. Wang B. [et al.]. [Belle] Measurement of  $\mathcal{B}(B_s \rightarrow D_s X)$  with  $B_s$  Semileptonic Tagging // Phys. Rev. D. 2021. V. 105: 012004.

## Моделирование процессов образования чармония $\chi_c$ в эксперименте ALICE3

А. М. Варламов<sup>1</sup>, Ю. В. Харлов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский институт» — ИФВЭ

Одним из ключевых измерений свойств кварк-глюонной материи при высокой температуре, образующейся в столкновениях тяжелых ионов при ультрарелятивистских энергиях, является изучение выходов связанных состояний тяжелых кварков и антикварков — кваркониев. В настоящее время готовится эксперимент следующего поколения ALICE3, основной целью которого будет изучение свойств кварк-глюонной материи в столкновении тяжелых ионов на БАК при высокой светимости [1]. Одной из задач данного эксперимента будет изучение свойств различных состояний чармония, обладающих разным потенциалом связи пар  $c\bar{c}$ , таких как  $J/\psi$ ,  $\chi_{cJ}$ ,  $J=1, 2$ . В работах [3, 4] было показано, что регистрация  $J/\psi$  возможна в дилептонных модах распада, а  $\chi_{cJ}$  должен реконструироваться в распадах на  $J/\psi + \gamma$ , причем регистрация фотонов от распадов  $\chi_{cJ}$  требует прецизионного измерения импульсов фотонов в диапазонах энергий от сотен МэВ до нескольких ГэВ.

Моделирование процессов образования и регистрации  $\chi_{cJ}$  в  $pp$ -столкновениях при энергии 14 ТэВ в эксперименте ALICE3, проведенное при помощи генератора событий Pythia8 с параметризованным откликом трекового детектора и электромагнитного калориметра, показывает возможность разделения сигналов от состояний  $\chi_{c1}$  и  $\chi_{c2}$  при использовании электромагнитного калориметра с рекордным на данный момент энергетическим разрешением на основе неорганических сцинтилляторов — кристаллов  $PbWO_4$  [5]. На рис. 1 приведены спектры разности инвариантных масс  $J/\psi + \gamma$  и  $J/\psi$  в ALICE3 при поперечных импульсах  $5 < p_T < 6$  ГэВ/с, на котором отчетливо наблюдаются пики  $\chi_{c1}$  и  $\chi_{c2}$  при  $\delta M = 0,414$  и  $0,459$  ГэВ/с соответственно. Статистическая значимость сигналов  $\chi_{cJ}$  в зависимости от  $p_T$ , при ожидаемой интегральной светимости данных в ALICE3 в течение одного года  $L_{int} = 3 \text{ фб}^{-1}$ , показана на рис. 2.

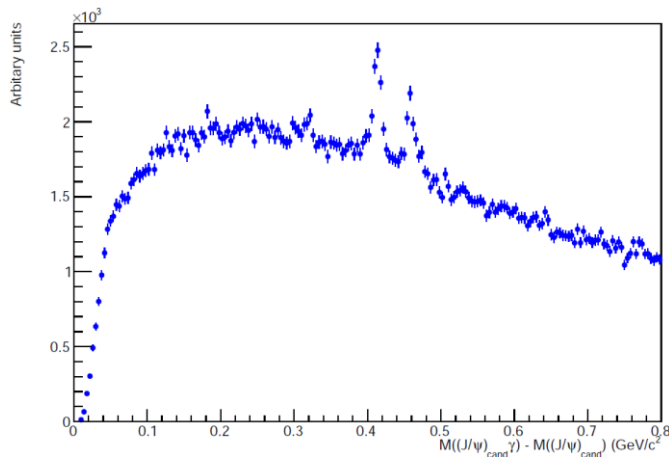


Рис. 1. Спектр разности инвариантных масс  $J/\psi + \gamma$  и  $J/\psi$  в  $pp$ -столкновениях  $\sqrt{s} = 14$  ТэВ и  $5 < p_T < 6$  ГэВ/с

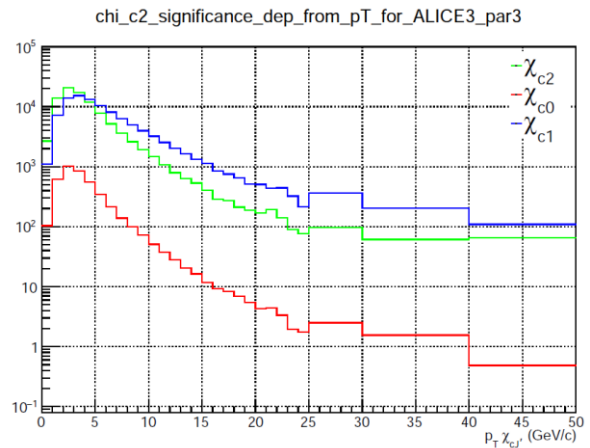


Рис. 2. Статистическая значимость спектров  $\chi_{cJ}$ , ожидаемая в ALICE3 за год набора данных

Для более реалистичного моделирования эксперимента ALICE3 была создана модель электромагнитного калориметра на основе GEANT4 [6] при конфигурации [7]. Дополнительно к энергии, выделенной в рабочем веществе калориметра, были добавлены стохастические флуктуации, определяемые конечным количеством фотоэлектронов, регистрируемых фотодетектором калориметра, а также флуктуации, определяемые аппаратными эффектами потери измеряемой выделенной энергии. Проведенное моделирование взаимодействия фотонов с калориметром, выполненным из вольфрамата свинца, позволило воспроизвести характеристики действующего фотонного спектрометра PHOS эксперимента ALICE [5], который является прототипом для калориметра в эксперименте [1]. Пример спектра энергий, выделенной фотоном с энергией 5 ГэВ в калориметре, приведен на рис. 3 (слева). Энергетическое разрешение в зависимости от энергии фотона (рис. 3, справа) воспроизводит экспериментально измеренное разрешение

PHOS [5] со стохастическим членом энергетического разрешения, равном  $0,034 \text{ ГэВ}^{1/2}$ , и константным членом, равным 1,25%.

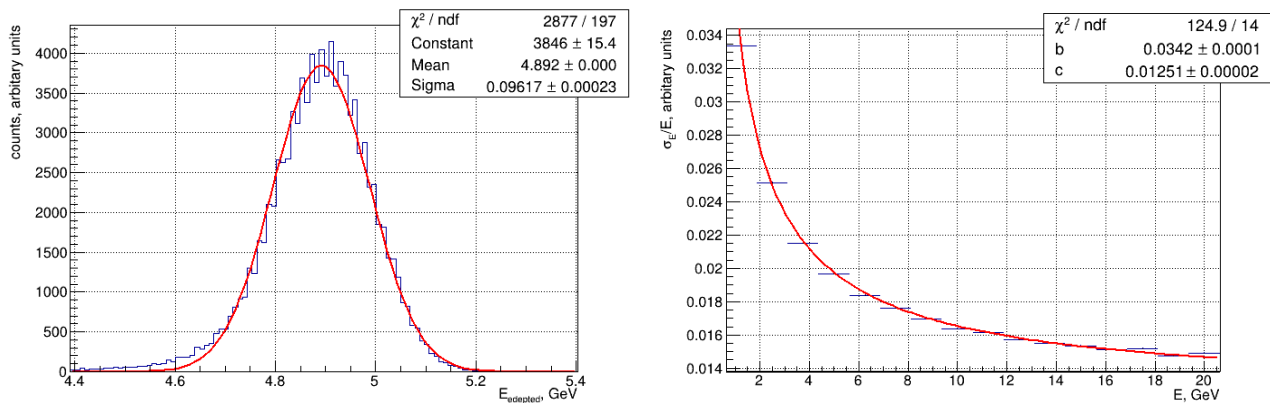


Рис.3. Спектр энерговыделения фотона, прошедшего через калориметрическую ячейку при начальной энергии 5 ГэВ после процедуры искажений, профитированный функцией распределения Гаусса (слева), и зависимость энергетического разрешения прецизионного калориметра от энергии (справа)

Созданная реалистичная модель электромагнитного калориметра будет применена для дальнейшего изучения возможности систематического измерения спектров образования состояний чармония в планируемом эксперименте ALICE3 [1].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 22-42-04405.

### Литература

1. Letter of intent for ALICE 3: A next generation heavy-ion experiment at the LHC/ALICE Collaboration//arXiv preprint. [2022]. arXiv: 2211.02491.
2. *Sjöstrand T., Ask S., Christiansen J. R.* [et al.]. An introduction to PYTHIA 8.2//Comput. Phys. Commun. 2015. V. 191. P. 159–177. DOI: 10.1016/j.cpc.2015.01.024.
3. *Варламов А. М., Харлов Ю. В.* Образование состояний чармония  $\chi_{cJ}$  ( $J=0, 1, 2$ ) в столкновениях протонов и тяжелых ионов на БАК//Труды 63-й Всероссийской научной конференции МФТИ (23–29 ноября 2020 г.). Секция: Фундаментальная и прикладная физика. — М.: МФТИ, 2020. С. 52–54.
4. *Варламов А. М., Харлов Ю. В.* О возможности исследования образования чармония в эксперименте ALICE3 на Большом адронном коллайдере//Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ (29 ноября — 03 декабря 2021 г.). Секция: Фундаментальная и прикладная физика. — М.: МФТИ, 2020. С. 89–91.
5. ALICE PHOS calorimeter Collaboration A high resolution electromagnetic calorimeter based on lead-tungstate crystals//Nucl. Instrum. Meth. A 2005. V. 550. P. 169–184.
6. *Agostinelli S.* [et al.] Geant4 — a simulation toolkit//Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2003. V. 506. P. 250–303.
7. *Allison J.* [et al.]. Recent developments in geant4//Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2016. V. 835. P. 186–225.

УДК 539.1.05

## Исследование свойств 3D-сегментированного детектора нейтрино СуперFGD

*М. А. Колупанова<sup>1,2</sup>, Ю. Г. Куденко<sup>1,2</sup>, А. В. Мефодьев<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт ядерных исследований РАН

СуперFGD — нейтринный детектор, создающийся в рамках апгрейда эксперимента T2K для дальнейшего исследования нейтринных осцилляций. Размер конструкции  $192 \times 56 \times 184 \text{ см}^3$  вдоль осей  $x$ – $y$ – $z$  соответственно. Главной составляющей являются 56 тыс. каналов и 2 млн сцинтилляционных кубиков из полистирола, 1,5% паратерфенила (ПТР) и 0,01% РОРОР [1], объемом  $1 \text{ см}^3$ , свет от которых собирается и считывается в трех ортогональных направлениях с помощью спектросмещающих волокон WLS Kuraray Co Y-11.

Исследование свойств проводилось на прототипе детектора СуперFGD, состоящего из 9216 сцинтилляционных кубиков (размером  $24 \times 8 \times 48 \text{ см}^3$ ) и 1728 каналов; для считывания сигнала использовались

кремниевые фотоумножители (Hamamatsu MPPC S13360-1325CS, S13081-050CS и S12571-025C), печатные платы Front End Boards (FEBs) на базе чипов CITIROC, разработанных университетом Женевы в рамках эксперимента WAGASCI и Baby-MIND [2].

Целью данной работы было получение временного разрешения и исследование прохождения заряженных частиц, в частности, остановки протонов в прототипе детектора СуперFGD с использованием пакетов ROOT. Тестирование проводилось на адронном пучке T9 в северной зоне ЦЕРНа в 2018 г.

### Литература

1. *Amaudruz P. A.* [et al]. The T2K fine-grained detectors // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A. 2012. V. 696. P. 1–31.
2. *Blondel A.* [et al]. The SuperFGD Prototype charged particle beam tests // JINST. 2020. V. 15(12): P12003.

УДК 539.1.01

## Фазовый переход в позитронии при движении в магнитном поле

*А. А. Симовонян*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)  
Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Позитроний (Ps) представляет собой связанное состояние электрона и позитрона и является легчайшим из известных атомов. Позитроний существует в двух состояниях: 1) триплетном  $^3S_1$  — ортопозитроний (o-Ps) и 2) синглетном  $^1S_0$  — парапозитроний (p-Ps). В силу С-инвариантности o-Ps аннигилируют на три фотона, а p-Ps — на два. Интерес к физике позитрония в последнее время значительно возрос в связи с его важной ролью в процессе прохождения  $\gamma$ -квантов, испускаемых нейтронной звездой, обладающей сильным магнитным полем  $10^{12} \div 10^{14}$  G (так называемый магнетар), через магнитоатмосферу.

В сильном магнитном поле разрешено расщепление  $\gamma$ -кванта на два и аннигиляция  $\gamma \rightarrow e^+e^-$  [1, 2]. В свободном пространстве оба процесса запрещены по кинематическим причинам. Возможен и третий процесс — переход  $\gamma$ -кванта в атом позитрония и образования смешанного состояния [3], которое А. Е. Шабад и В. В. Усов предложили называть светопозитронием.

В докладе рассмотрен спектр позитрония при движении в сильном магнитном поле и показано, что при определенных значениях напряженности магнитного поля и скорости движения позитрония структура спектра испытывает фазовый переход и наряду с кулоновскими уровнями возникает спектр магнитных уровней с огромным дипольным моментом.

Вероятность такого перехода связана с тем, что при движении связанной системы двух частиц с противоположными зарядами в магнитном поле невозможно отделить внутреннюю динамику от движения центра масс. Этот факт обсуждался в работах Лэмба и Горькова, Дзялошинского [5, 6].

Также в докладе показано, что основным состоянием позитрония Ps может оказаться не кулоновский уровень, а магнитный при определенных значениях магнитного поля и псевдоимпульса. В ходе дальнейшей работы будут исследованы следствия этого факта на поглощение  $\gamma$ -квантов в магнитоатмосфере нейтронной звезды.

### Литература

1. *Wunner G., Herold H.* Decay of positronium in strong magnetic fields // Astrophys. Space Sci. 1979. V. 63. P. 503–509.
2. *Herold H., Ruder H., Wunner G.* Can  $\gamma$  quanta really be captured by pulsar magnetic fields? // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54(13). P. 1452–1455.
3. *Усов В. В., Шабад А. Е.* Светопозитроний в магнитосфере пульсара // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т. 42. № 1. С. 17–20.
4. *Burkova L. A.* [et al.]. Hydrogen-like system in crossed electric and magnetic fields // Sov. Phys. JETP. 1976. V. 44. P. 276.
5. *Gor'kov L. P., Dzyaloshinskii I. E.* Contribution to the theory of the Mott exciton in a strong magnetic field // Sov. Phys. JETP. 1968. V. 26. P. 449–451.
6. *Lamb Jr W. E.* Fine structure of the hydrogen atom. III // Physical Review. 1952. V. 85(2). P. 259–276.



## Измерение и мониторинг светимости на установке ALICE Большого адронного коллайдера (ЦЕРН)

*А. А. Фурс, Н. О. Вознюк, Т. Л. Каравичева, Д. В. Серебряков, М. А. Суханов*

Институт ядерных исследований РАН

Эксперимент ALICE Большого адронного коллайдера (БАК) предназначен для изучения свойств ядерной материи при экстремально высокой температуре и плотности энергии, образующейся в ядроядерных столкновениях на встречных пучках [1]. Вычисления абсолютных сечений в адронных столкновениях имеют решающее значение для физической программы эксперимента ALICE. Эти вычисления требуют точного знания светимости, обеспечиваемой БАК. Определение светимости в ALICE основано на видимых сечениях, измеренных в специальных сеансах калибровки — сканированиях Ван дер Меера (vdM). Объединение информации, полученной от детектора FIT и приборов БАК, позволяет достичь процентного уровня точности определения светимости. Мониторинг светимости в режиме онлайн/оффлайн необходим для оценки и контроля скорости набора статистики и планирования эксперимента. Многофункциональный передний детектор FIT [2] является основным люминометром эксперимента ALICE.

В данной работе представлен обзор методологии определения светимости ALICE и первых результатов, полученных в ходе третьего запуска БАК в 2022 г., с описанием экспериментальной установки и многофункционального детектора FIT [2].

### Литература

1. *Abelev B.* [et al., ALICE Collaboration]. Upgrade of the ALICE experiment: letter of intent // *J. Phys. G. Nucl. Part. Phys.* 2014. V. 41: 087001, DOI: 10.1088/0954-3899/41/8/087001.
2. *Trzaska W. H.* [et al., ALICE Collaboration]. New ALICE detectors for Run 3 and 4 at the CERN LHC // *Nucl. Instrum. Methods A*. 2020. V. 958: 162116. DOI: 10.1016/j.nima.2019.04.070.

# Секция «ИТЭР — шаг в энергетику будущего»

Председатель: Е. П. Велихов (д. ф.-м. н., академик РАН)

Зам. председателя: А. В. Красильников (д. ф.-м. н.)

Секретарь: И. М. Позняк (к. ф.-м. н.)

Дата: 04.04.2023

Время: 10:00

УДК 533.9.082

## Измерение рассеянных вертикальных полей в токамаке MERNIST-0 с помощью электронного пучка

*Е. А. Виноцкий<sup>1,2</sup>, Н. Е. Ефимов<sup>1</sup>, А. С. Пришвицын<sup>1</sup>, С. А. Крат<sup>1</sup>, И. А. Сорокин<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН

В учебно-исследовательском токамаке MERNIST-0 принято решение вместо отдельных катушек тороидального поля использовать соленоид, намотанный на тороидальную поверхность [1]. Пример такой системы тороидального магнитного поля представлен на рис. 1. Данная конфигурация обеспечивает синхронную работу каждого сегмента соленооида и уменьшает количество рассеянных полей токоподводов.

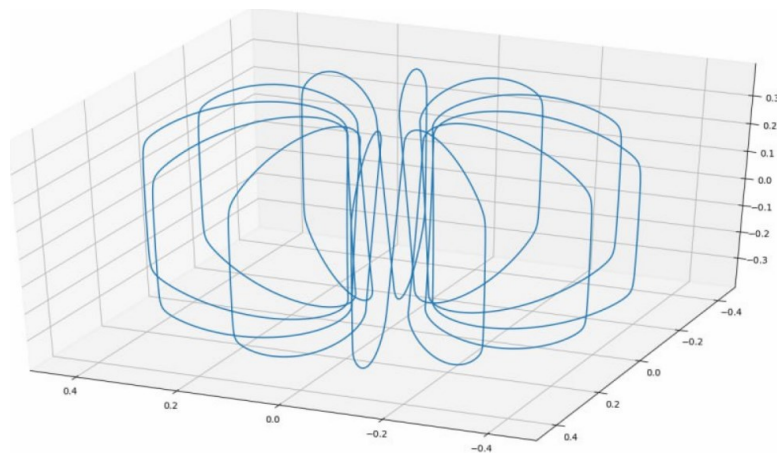


Рис. 1. Пример тороидального соленооида, намотанного на тороид. Каждый виток катушки плавно переходит в другой на внутреннем обходе тороида

Основной недостаток данного решения — возникновение рассеянных вертикальных и радиальных полей. В связи с этим возникает задача экспериментального определения таких полей. Для детектирования небольших рассеянных полей может использоваться электронный пучок. Данный метод применялся ранее на токамаке KSTAR [2] и TEXTOR [3].

В работе описаны физические основы метода, методика расчета и основные параметры эксперимента, результаты для токамака MERNIST-0. Показано, что данным методом возможно обнаружить малые тороидально усредненные вертикальные поля. Для создания электронного пучка используется электронная пушка, частицы которой возбуждают газ при давлении  $2 \cdot 10^{-4}$  торр. Отклонения пучка электронов детектируется с помощью камеры через смотровое окно экваториального патрубка токамака. В ходе экспериментов наблюдались значительные смещения луча. В результате моделирования было показано, что основная часть смещения пучка соответствует центробежному дрейфу, а не рассеянными вертикальными полями. При этом отношение вертикального магнитного поля к тороидальному не превышает 2%, что говорит о влиянии вертикального поля на процессы удержания и создания плазмы и требует дополнительной компенсации.

## Литература

1. *Левцкий А. Н., Федоров О. В., Цаун С. В., Шаховец К. Г., Юшманов П. В.* Разработка системы тороидального магнитного поля в сферическом токамаке GLOBUS. Препринт ИАЭ-546/7. — М.: ИАЭ им. И. В. Курчатова, 1992.
2. *England A. C.* [et al.]. Tokamak field error measurements with an electron beam in KSTAR // Fusion Eng. Des. 2011. V. 86(1). P. 20–26.
3. *Neubauer O., Bohn F. H., Chudnovskij A., Giesen B., Hüttemann P. W., Lochter M.* Measurement of the vertical magnetic field in textor using the electron beam technique // Fusion Technol. 1997. V. 31. P. 154–158.

УДК 004.94

### Численная модель воздействия интенсивного плазменного потока на макеты защитных покрытий токамака ИТЭР

*И. А. Алябьев<sup>1,2</sup>, В. Ю. Цыбенко<sup>2</sup>, Е. З. Бирюлин<sup>1,2</sup>, И. М. Позняк<sup>1,2</sup>, З. И. Новоселова<sup>1,2</sup>,  
Е. Д. Федулаев<sup>1,2</sup>, А. Б. Путрик<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>ГНЦ РФ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований

<sup>3</sup>Проектный центр ИТЭР

В ходе работы реактора ИТЭР защитные покрытия дивертора и первой стенки будут подвергаться плазменно-тепловому воздействию. Наиболее интенсивное воздействие будет происходить во время переходных процессов — срывов плазменного шнура и периферийных локальных неустойчивостей (ELM). Пороги плавления основных конструкционных материалов вакуумной камеры ИТЭР — вольфрама и бериллия — составляют 50 и 28 МДж/(м<sup>2</sup> · с<sup>0,5</sup>) соответственно. Фактор теплового воздействия при ELM-событиях составит 15 ÷ 300 МДж/(м<sup>2</sup> · с<sup>0,5</sup>), а при срывах 90 ÷ 2000 МДж/(м<sup>2</sup> · с<sup>0,5</sup>) [1]. Эрозия облицовочных покрытий за счет перемещения расплава повлияет на ресурс реактора и требует изучения. В проведенных ранее экспериментах показано, что разрушение металлических защитных покрытий будет происходить в основном за счет перемещения расплавленного слоя по их поверхности [2]. Для развития представлений о происходящих физических процессах требуется разработка численных моделей и сравнение результатов расчета с экспериментом.

В данной работе представлена расчетная модель, описывающая поведение металла под действием мощного плазменного потока. Модель основана на системе уравнений теплопроводности и гидродинамики:

$$\begin{cases} \rho C_p^{\text{eq}} \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p^{\text{eq}} \mathbf{U} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q_e + Q_v, \\ \rho \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \rho (\vec{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} = \nabla \cdot \{p2[I] + \mu[\nabla \mathbf{U}] + (\nabla \mathbf{U})^T\} + \mathbf{F}_d + \mathbf{F}_p + \rho \mathbf{g} + \mathbf{j} \cdot \mathbf{B} + \gamma(\nabla_t \cdot \vec{n})\vec{n} + \nabla_t \gamma, \\ \rho \nabla \cdot \mathbf{U} = 0. \end{cases}$$

Здесь  $\rho$  — плотность,  $C_p^{\text{eq}}$  — эквивалентная теплоемкость,  $k$  — теплопроводность,  $T$  — температура,  $\mathbf{U}$  — скорость металла,  $p$  — давление,  $\mu$  — вязкость,  $[I]$  — единичная матрица,  $Q_e$  — мощность плазменного нагрева. В расчете учитываются потери тепла на испарение  $Q_v$ , но отсутствуют радиационные и конвекционные потери. Фазовый переход от твердого тела к расплавленному металлу моделируется с использованием метода эквивалентной теплоемкости [3]. Свойства материала, такие как теплоемкость, теплопроводность, плотность, вязкость, коэффициент поверхностного натяжения в модели зависят от температуры. Гидродинамическая задача решается в присутствии силы поверхностного натяжения и силы, возникающей из-за эффекта Марангони.

Электромагнитная часть задачи описывается следующей системой уравнений:

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j}, \mathbf{E} = -\nabla V - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \\ \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \\ \mathbf{j} = \sigma_e(\mathbf{E} + \mathbf{V} \times \mathbf{B}), \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \end{cases}$$

Здесь  $\mathbf{B}$  — магнитная индукция,  $\mathbf{H}$  — напряженность магнитного поля,  $\mathbf{j}$  — плотность тока,  $\mathbf{E}$  — напряженность электрического поля,  $V$  — скалярный электромагнитный потенциал,  $\mathbf{A}$  — векторный потенциал

электромагнитного поля,  $\sigma_e$  — удельная проводимость. Сила Лоренца, полученная из решения этой системы, учитывается в уравнении Навье–Стокса. Задача о перемещении свободной поверхности решается с помощью произвольного лагранжево–эйлерова метода (ALE).

Были получены значения скорости и перемещения расплава при различных значениях мощности плазменного воздействия. Показано, что перемещение расплава нельзя объяснить наличием одного только градиента давления плазмы по поверхности мишени, что подтверждает выводы работы [2]. Введение в модель дополнительной тангенциальной силы трения плазмы о поверхность позволяет добиться лучшего совпадения результатов моделирования с результатами эксперимента. Результаты расчетов демонстрируют образование кольцевой волновой структуры на поверхности мишени, что также было обнаружено экспериментально [2]. Волны появляются в результате первого плазменного воздействия; при дальнейших облучениях их амплитуда нарастает, но перемещения вдоль поверхности не происходит. Обнаружена линейная зависимость глубины кратера эрозии от числа плазменных облучений, что также подтверждается экспериментально [2].

Проведено моделирование движения жидкометаллического расплава при наличии внешнего постоянного магнитного поля, направленного перпендикулярно поверхности мишени. Определено влияние силы Лоренца, а также сил поверхностного натяжения на динамику движения расплава.

Работа выполнена при финансовой поддержке и в рамках договора № 17706413348220000170/35-22/01 от 28 апреля 2022 г.

### Литература

1. *Pitts R. A.* [et al.]. A full tungsten divertor for ITER: Physics issues and design status // *J. Nucl. Mater.* 2013. V. 438. P. S48–S56.
2. *Позняк И. М.* [и др.]. Эрозия металлов при воздействии интенсивных потоков плазмы // *ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез.* 2012. Вып. 4. С. 23–33.
3. *Voller V. R., Swaminathan C. R., Thomas B. G.* Fixed Grid Techniques for Phase Change Problems: A Review // *Int. J. Numer. Method. Eng.* 1990. V. 30. P. 875–898.

УДК 533.952

### Исследование параметров периферийной плазмы Z-пинча с помощью квазиплоскопольного спектрографа

*Г. А. Старцев<sup>1,2</sup>, А. Н. Грицук<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Пинч-эффект — процесс сжатия среды с током под действием магнитного поля, индуцированного этим током. Современные Z-пинчи — самосжатые разряды сверхтераваттной мощности в различных плазмообразующих средах. Одной из главных задач, решаемых на этих установках, является увеличение мощности импульса мягкого рентгеновского излучения (МРИ), получаемого при токовой имплозии многопроволочных сборок. На финальной стадии сжатия такихборок развиваются различные неустойчивости. Основная из них — магнитная релей–тейлоровская (МРТ) неустойчивость внешней границы плазмы. Для повышения эффективности перекачки энергии в пинч и повышения мощности МРИ важно исследовать отставшую плазму пинча, образующуюся в результате МРТ-неустойчивости и негативно влияющую на амплитуду и длительность импульса МРИ.

В работе представлен метод для изучения параметров отставшей плазмы с помощью спектрографа. Разработана методика измерения спектра пинча с пространственным по радиусу и временным разрешением. Для этого на установке «Ангара 5-1» в АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ» используется квазиплоскопольный спектрограф на основе вогнутой дифракционной решетки. В качестве регистратора изображения спектра используется МКП-детектор. Для спектрографа было рассчитано спектральное разрешение, которое составляет  $\approx 0,20 \div 0,25 \text{ \AA}$  в интересующем спектральном диапазоне. Получены спектры пинчей как одиночных, так и вложенныхборок с пространственным и временным разрешением. Измерена ширина излучающей области в различных спектральных диапазонах. Результаты измерений согласуются с данными, получаемыми на рентгеновских кадровых изображениях. Кроме того, исследованы временные характеристики спектра пинча в моменты времени, близкие к максимуму генерации импульса МРИ.

В ходе дальнейшей работы будет исследовано пространственное распределение температуры термоядерной периферийной плазмы Z-пинча. По отношению интенсивностей близко расположенных линий [H]-подобного (переход 1–2) и [He]-подобного (переход 1–3) ионов углерода планируется определить электронную температуру плазмы. Квазиплоскопольный спектрограф установлен по схеме, обеспечивающей пространственное распределение по радиусу, что позволяет измерять температуру на различных расстояниях от оси пинча. Пример такого распределения, полученного в одном из экспериментов, приведен на рис. 1.

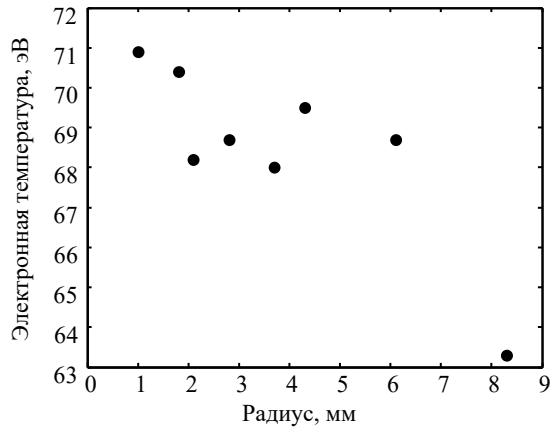


Рис. 1. Пространственное распределение электронной температуры периферийной плазмы Z-пинча (лайнер: металлизированная цилиндрическая сборка из 40 капроновых волокон с нанесением слоя индия толщиной 0,47 мкм, диаметр сборки 12 мм)

### Литература

1. Митрофанов К. Н., Александров В. В. [и др.]. Эффективный способ увеличения пиковой мощности МРИ в экспериментах по имплозии вложенныхборок смешанного состава // Физика плазмы. 2021. Т. 47. № 10. С. 887–920.
2. Antsiferov P. S., Dorokhin L. A. Grazing incidence off Rowland spectrometer with shifted slit // Rev. Sci. Instrum. 2016. V. 87: 053106.
3. Бороздин Ю. Э., Казаков Е. Д. [и др.]. Рентгеновская и вакуумно-ультрафиолетовая спектроскопии плазмы с использованием новых фокусирующих многослойных структур // Письма в ЖЭТФ. 2008. Т. 87. № 1. С. 33–35.

УДК 533.922

## Восстановление пространственного распределения интенсивности нейтронного излучения плазмы в токамаке ИТЭР методами машинного обучения

А. С. Жаров<sup>1,2</sup>, Р. Н. Родионов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Частное учреждение «ИТЭР-Центр»

Главная задача сооружаемого в настоящее время токамака ИТЭР — продемонстрировать возможность создания и удержания DT-плазмы, в которой термоядерная мощность превышает мощность внешнего нагрева [1]. Нейтронные диагностики являются одними из ключевых диагностических систем в проекте ИТЭР, поскольку нейтронное излучение является непосредственным свидетельством протекания термоядерных реакций в плазме. Измерение характеристик нейтронного излучения плазмы позволяет получить важную информацию о физических процессах, протекающих в ней, а также обеспечить безопасное функционирование установки.

Вертикальная нейтронная камера (ВНК) токамака ИТЭР — нейтронная диагностическая система, предназначенная для измерения пространственного распределения интенсивности нейтронного излучения плазмы в полоидальном сечении, а также полной интенсивности нейтронного излучения и термоядерной мощности плазмы [2]. Для решения поставленной задачи ВНК содержит 11 нейтронных коллиматоров, на конце каждого из которых устанавливаются нейтронные детекторы (по 2 ионизационных камеры деления и 2 алмазных детектора).

Ранее рассматривалось решение задачи томографии профиля нейтронного источника плазмы по измерениям ВНК методом максимального правдоподобия [3]. В настоящей работе рассмотрена возможность томографии нейтронного источника плазмы в токамаке ИТЭР с использованием методов машинного обучения (ML). Преимущество данного подхода заключается в том, что обученный алгоритм (например, нейронная сеть) сможет проводить восстановление профиля нейтронного источника в режиме реального времени [4]. В качестве обучающей выборки использовались результаты моделирования сигналов детекторов ВНК [5] для различных сценариев плазмы [6] с наложенными погрешностями измерений.

В докладе представлено восстановление интегральных характеристик нейтронного излучения плазмы (полная интенсивность излучения DD- и DT-нейтронов, полная термоядерная мощность) с использованием линейной регрессии и многослойной полносвязной нейронной сети. Предсказанные характеристики были сравнены со сгенерированными значениями. Средняя квадратическая ошибка (MSE) и средняя абсолютная ошибка (MAE) использовались как метрики качества.

Для восстановления профиля нейтронного излучения использовались нейронные сети с более сложной архитектурой. При этом потребовалось введение дополнительной априорной информации о форме нейтронного источника: интенсивность нейтронного излучения предполагалась постоянной вдоль магнитных поверхностей. Форма магнитных поверхностей считается известной из данных по равновесию плазмы. Предсказанные двумерные распределения были сопоставлены с истинными профилями. В качестве метрик использовались нормализованная средняя квадратическая ошибка (NMSE), а также пиковое отношение сигнала к шуму (PSNR) и индекс структурного сходства (SSIM), широко используемые для оценки качества изображений.

Нейросетевые методы продемонстрировали низкие значения MSE и MAE при восстановлении интегральных характеристик нейтронного излучения плазмы, что свидетельствует об их успешной реконструкции. В случае восстановления профиля нейтронного излучения метрики качества NMSE, PSNR и SSIM не достигают удовлетворительных значений. Требуется рассмотрение альтернативных архитектур нейронных сетей, методов их регуляризации и привлечение дополнительных вычислительных ресурсов.

## Литература

1. *Bigot B.* Progress toward ITER's first plasma // Nucl. Fusion. 2019. V. 59(11): 112001.
2. *Bertalot L.* [et al.]. Concept design and integration aspects of ITER vertical neutron camera // Proc. Conference on Plasma Diagnostics (ECPD) 14–17 April 2015, Frascati, Italy [online]. Art. 090. DOI: 10.22323/1.240.0090.
3. *Rodionov R., Nemtcev G., Krasilnikov A.* Fusion neutron emissivity tomography for ITER Vertical Neutron Camera // Nucl. Instrum. Meth. A. 2022. V. 1040: 167127. DOI: 10.1016/j.nima.2022.167127.
4. *Mlynar J.* [et al.]. Current research into applications of tomography for fusion diagnostics // J. Fusion Energy. 2019. V. 38. P. 458–466.
5. *Rodionov R.* [et al.]. Calculation of DD and DT neutron contribution matrix for ITER Vertical neutron camera detectors // Fusion Eng. Des. 2021. V. 173: 112874.
6. *Polevoi A.R.* [et al.]. Assessment of neutron emission from DD to DT operation of ITER // Proc. 42<sup>nd</sup> EPS Conference on Plasma Physics. 2015. URL: <http://ocs.ciemat.es/EPS2015PAP/pdf/P4.126.pdf>.

УДК 533.9.082.7

## Моделирование спектра нейтронного излучения в каналах коллиматоров ВНК ИТЭР на основе функции распределения быстрых ионов плазмы

*П. А. Ревякин, Р. Н. Родионов*

Частное учреждение «ИТЭР-Центр»

ИТЭР — строящийся в настоящее время международный экспериментальный термоядерный токамак-реактор. Одной из задач ИТЭР является создание самоподдерживающегося плазменного разряда. Для нагрева плазмы предполагается использовать системы дополнительного нагрева: инжекция нейтральных атомов, ионно-циклотронный и электронно-циклотронный резонанс суммарной мощностью более 50 МВт, под влиянием которых будет формироваться заметная популяция надтепловых ионов, что, в свою очередь, влияет на энергетическое распределение нейтронов, рождаемых в термоядерных реакциях.

Вертикальная нейтронная камера — диагностика ИТЭР, предназначенная для измерения пространственного распределения источника термоядерных нейтронов. Ранее был выполнен анализ возможности

томографии профиля нейтронного источника и восстановления ионной температуры в предположении изотропии нейтронного излучения плазмы [1]. Однако в разрядах с DD-плазмой данное предположение не выполняется вследствие высокой доли нейтронов, рожденных в реакциях с надтепловыми ионами, что необходимо учитывать при измерениях ВНК.

В данной работе был выполнен расчет плазменного нейтронного источника на основе функции распределения быстрых ионов плазмы и смоделированы спектры нейтронов в каналах коллиматоров ВНК. Используя функции откликов [2], были рассчитаны сигналы детекторов диагностики.

Результаты моделирования демонстрируют влияние надтепловой доли ионов на сигналы нейтронных детекторов, что позволяет оценить эффективность нагрева плазмы. Показано, что присутствие быстрых ионов существенно не повлияет на измерения температуры ионов и профиля нейтронного источника в DT-плазме, но должно учитываться в экспериментах с DD-плазмой.

Работа выполнена в рамках государственного контракта № Н.4а.241.19.22.1123 от 14.02.22 «Разработка, опытное изготовление, испытание и подготовка к поставке специального оборудования в обеспечение выполнения российских обязательств по проекту ИТЭР в 2022 году».

### Литература

1. *Rodionov R., Nemtcev G., Krasilnikov A.* Fusion neutron emissivity tomography for ITER Vertical Neutron Camera // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2022 V. 1040: 167127.
2. *Ревякин П. А., Немцев Г. Е., Кумпилов Д. А., Родионов Р. Н., Кормилицын Т. М.* Расчет отклика алмазных детекторов вертикальной нейтронной камеры ИТЭР // XIX Всероссийская конференция «Диагностика высокотемпературной плазмы», 2021. Тезисы докладов. — М.: Троянт, 2021. С. 62–63.

УДК 533.9.082

## Измерение характеристик двухканального спектрометра-полихроматора высокого разрешения для активной спектроскопии плазмы токамака EAST

*И. А. Макаренко<sup>1,2</sup>, Н. В. Кузьмин<sup>1,2</sup>, С. Н. Тугаринов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Проектный центр ИТЭР

Системы диагностики термоядерной плазмы играют важнейшую роль в управлении работой реактора и сборе экспериментальных данных для исследования процессов, протекающих в термоядерной плазме. Практически на всех современных и строящихся токамаках используется и играет ключевую роль корпускулярно-спектроскопическая диагностика, также называемая активной спектроскопией (АС, CXRS — Charge eXchange Recombination Spectroscopy) [1–3]. Активная спектроскопия позволяет измерять ионную температуру плазмы, скорость ее тороидального и полоидального вращения, концентрацию легких примесей (в том числе гелиевой золы) по всему сечению плазменного шнура с высоким пространственным и временным разрешением.

В основе активной спектроскопической диагностики лежит специально разработанный спектрометр-полихроматор высокого разрешения, позволяющий проводить измерения в двух/трех спектральных диапазонах одновременно:  $468 \pm 5$  нм,  $529 \pm 5$  нм и  $656 \pm 6$  нм. В эти диапазоны попадают спектральные линии компонент плазмы (H I 656,3 нм; He II 468,6 нм; Be IV 465,8 нм; C VI 529,1 нм; Ne X 524,9 нм и др.), по доплеровскому уширению и сдвигу спектральных линий которых определяются ионная температура и скорость вращения плазмы, а по абсолютной интенсивности излучения линии определяется концентрация легких примесей.

В рамках подготовки к применению спектрометра-полихроматора высокого разрешения в АС-исследованиях на токамаке EAST [4], было проведено измерение основных характеристик разработанного спектрометра. А именно, были зарегистрированы спектры излучения лабораторных газоразрядных источников излучения (He, Ne и D), измерены аппаратные функции спектрометра для различных ширин входной щели спектрометра при ее заполнении рядами оптоволокон диаметром 400 мкм, проведена спектральная калибровка в рабочих спектральных диапазонах и рассчитана обратная линейная дисперсия. Результаты исследования характеристик спектрометра приводятся в данном докладе.

## Литература

1. Диагностика плазмы / под ред. М. И. Пергамента. — М.: Энергоатомиздат, 1990. Вып. 7. С. 56–111.
2. *Von Hellermann M. G.* [et al.]. Visible charge exchange spectroscopy at JET // *Rev. Sci. Instrum.* 1990. V. 61(11). P. 3479. DOI: 10.1063/1.1141975.
3. *Тугаринов С. Н.* [и др.]. Трехдиапазонный спектрометр высокого разрешения для диагностической системы // *Приборы и техника эксперимента.* 2016. № 1. С. 102–107.
4. *Li Y. Y.* [et al.]. First measurement of the edge charge exchange recombination spectroscopy on EAST tokamak // *Rev. Sci. Instrum.* 2016. V. 87(11): 11E501. DOI: 10.1063/1.4955279.

УДК 53.082.79

### Анализ функции отклика детектора быстрых нейтронов на основе кристалла хлорида лантана

*А. В. Панкратенко<sup>1,2</sup>, А. С. Джурик<sup>2</sup>, С. Ю. Обудовский<sup>2</sup>, Т. М. Кормилицын<sup>1,2</sup>, Ю. А. Кащук<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Проектный центр ИТЭР

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

Функции отклика детектора с кристаллом  $\varnothing 25,4 \times 25,4$  мм были исследованы 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.

В обоих экспериментах оцифровка сигнала детектора производилась быстрым АЦП частотой дискретизации 500 МГц и разрядностью 14 бит.

В ходе работы со сцинтилляционным детектором на основе  $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$  проведена калибровка энергетической шкалы детектора с использованием эталонных  $\gamma$ -источников ОСГИ, а также характерной для реакции  $^9\text{Be}(\alpha, n)^{12}\text{C}$   $\gamma$ -линии 4,44 МэВ. С помощью цифрового метода разделения сигналов по форме импульса [2] выделены вызванные нейтронами компоненты сигнала. Исследована возможность использования детектора в качестве монитора потока быстрых нейтронов. Полученные амплитудные спектры, а также результаты моделирования отклика детектора с помощью ПО GEANT4 [3] позволили оценить  $p/\beta$ -отношение для данного кристалла, рассчитать чувствительность и энергетическое разрешение спектрометра, а также провести анализ зарегистрированного аппаратурного спектра и определить наблюдаемые реакции для нейтронов с  $E_n \sim 2 \div 10$  МэВ. Разрешение по нейтронам составило  $7 \div 8\%$ ; коэффициент  $p/\beta \sim 0,75 \div 0,85$  в области энергий  $2 \div 8$  МэВ.

Полученные результаты позволяют говорить о перспективности использования детектора  $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$  в целях спектрометрии быстрых нейтронов в диапазоне энергий DD-нейтронов, в том числе при экспериментах с дейтериевой плазмой на действующих токамаках. Использование для спектрометрии нейтронов с  $E_n > 5$  МэВ затруднено из-за низкого сечения реакции и малой статистики.

Работа выполнена в рамках реализации рабочего соглашения № 1 (ITER ref. IO/21/CT/4300002685) между международной организацией ИТЭР, частным учреждением «ИТЭР-Центр» и ФГУП «ВНИИА» «Исследование и разработка технического проекта компонентов нейтронных генераторов пригодных для in-situ калибровки нейтронных диагностик ИТЭР».

## Литература

1. *Kormilitsyn T. M.* [et al.]. Novel  $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$ -based spectrometer for deuterium plasma neutron diagnostics // *Rev. Sci. Instrum.* 2021. V. 92(4): 043528. DOI: 10.1063/5.0042394.
2. *Pankratenko A. V.* [et al.]. Digital Pulse Shape Discrimination Method for D–D Neutron Spectrometry Using the  $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$  Scintillator. *Phys. Part. Nucl. Lett.* 2022. V. 19(1). P. 66–76. DOI: 10.1134/S1547477122010095.
3. *Allison J.* [et al.]. Recent developments in GEANT4 // *Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B.* 2016. V. 835. P. 186–225. DOI: 10.1016/j.nima.2016.06.125.



## Общий аналитический подход к вычислению тороидальных токов индукции в резистивной стенке токамака

*Н. В. Чукашев<sup>1,2</sup>, В. Д. Пустовитов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Одной из актуальных теоретических проблем в исследованиях на токамаках является учет влияния реакции вакуумной камеры (стенки) на переходные процессы. Всякое событие, сопровождаемое изменением магнитного поля, вызывает в стенке вихревые токи, которые противодействуют быстрому развитию неуправляемых процессов, трансформируя микросекундные явления в миллисекундный диапазон и обеспечивая тем самым частичную стабилизацию неустойчивостей. Неизбежная расплата за это — появление больших механических нагрузок на стенку из-за взаимодействия индуцированных токов с внешним электромагнитным полем. Решение таких задач необходимо для выбора операционных режимов в токамаках с большой энергией, запасенной в плазме [1–3]. В частности, эти задачи важны для токамака ИТЭР.

Эволюция токов в резистивной стенке носит диссипативный характер и чаще всего рассчитывается с использованием численных моделей [3–5]. Тем не менее ключевые эффекты, связанные с резистивностью стенки токамака, удастся описать аналитически. Наглядным примером служит работа [6], где с помощью метода функции Грина удалось учесть влияние токов, наведенных в кожухе круглого сечения, на равновесие плазмы. В нашей работе на основе этой техники построен общий аналитический алгоритм вычисления токов, наведенных в тороидальной стенке с вытянутым сечением.

Рассмотрение проводится в аксиально симметричной геометрии, что означает независимость физических величин от тороидального угла  $\zeta$  в цилиндрических координатах  $(r, \zeta, z)$ . Стенка ( $w$ ) представлена полый проводящей оболочкой с большим радиусом  $R_w$  и проводимостью  $\sigma = \text{const}$ . Вихревые токи определяются уравнениями Максвелла и законом Ома. В конечном счете их описание в пренебрежении скин-эффектом сводится к одномерному интегральному уравнению

$$\psi^w(\ell) + \tau_w \int_0^L \dot{\psi}^w(\ell_w) \frac{G(\ell; \ell_w)}{r(\ell_w)} \frac{d\ell_w}{b_w} = \varphi(\ell), \quad (1)$$

где  $\psi^w$  — полоидальный магнитный поток, создаваемый токами в стенке, а интеграл берется вдоль ее контура длиной  $L$ . Здесь  $\ell$  и  $d\ell_w$  — переменная длины дуги и элемент длины контура,  $\tau_w \equiv \mu_0 \sigma b_w d_w$  — резистивное время стенки,  $b_w$  и  $d_w$  — ее малый радиус и толщина, которые считаются постоянными,  $G$  — осесимметричная функция Грина [5], а

$$\varphi(\ell, t) \equiv -\tau_w \int_0^L G(\ell; \ell_w) \frac{\dot{\psi}^s(\ell_w, t)}{r(\ell_w)} \frac{d\ell_w}{b_w} \quad (2)$$

— функция источника. Точка обозначает производную по времени, а индекс  $s$  — внешнее возмущение полоидального потока, включающее в себя вклады от плазмы и внешних катушек.

Функция  $\psi^w(\ell, t)$  полностью описывает эволюцию токов индукции, возбуждаемых в тороидальной стенке, и должна быть найдена из уравнения (1). В большинстве случаев задача решается численно для заданного возмущения  $\dot{\psi}^s$  и в конкретной геометрии стенки [3, 4]. При этом описание оказывается довольно сложным [5].

В нашей работе показано, что для произвольного переходного процесса  $\varphi(\ell, t)$  общее аналитическое решение (1) имеет простой вид

$$\psi^w(\ell, t) = \sum_m \left( \frac{C_m}{\sqrt{r}}, X_m \right) \sqrt{r(\ell)} X_m(\ell), \quad (3)$$

где скобки соответствуют скалярному произведению в функциональном пространстве,

$$C_m \equiv \psi_0(\ell) \exp\left(-\lambda_m \frac{t}{\tau_w}\right) - \int_0^{\infty} \dot{\psi}^s(t') \exp\left(\lambda_m \frac{t'-t}{\tau_w}\right) dt' \quad (4)$$

— коэффициенты Фурье,  $\psi_0(\ell)$  — исходное распределение функции  $\Psi^w$  по сечению стенки (начальное условие),  $\lambda_m$  — характеристические числа, а  $X_m(\ell)$  — собственные функции однородного интегрального уравнения

$$X_m(\ell) + \lambda_m \int_0^L X_m(\ell_w) \frac{G(\ell; \ell_w)}{\sqrt{r(\ell)r(\ell_w)}} \frac{d\ell_w}{b_w} = 0. \quad (5)$$

Из формул (3) и (4) следует, что электромагнитный отклик стенки на любой переходный процесс определяется возбуждением и затуханием собственных мод вакуумной камеры, которые подчиняются уравнению (5). Поскольку его ядро эрмитово, то по теореме Гильберта–Шмидта ряд (3) сходится абсолютно и равномерно. Так как характеристические числа  $\lambda_m$  положительны и возрастают по модулю, амплитуда высших гармоник убывает с ростом волнового числа  $m$ , что позволяет учитывать лишь первые несколько членов разложения (3). В частности, в работе [3] было показано численно, что всего 5–6 гармоник достаточно для надежного описания реакции стенки токамака ИТЭР на VDE в плазме. Таким образом, этот результат объяснен теперь теоретически.

Для практического применения формулы (3) необходимо решить задачу на собственные функции интегрального оператора (5). Их явные выражения определяются формой стенки и в ряде частных случаев могут быть найдены с помощью хорошо развитых аналитических методов. Например, для камеры круглого сечения решениями (5) являются тригонометрические функции полярного угла, что совпадает с результатами [6]. С помощью преобразования функции Грина [7] можно найти собственные моды стенки с вытянутым сечением, являющимся хорошим приближением для вакуумных камер современных токамаков.

### Литература

1. *Hollmann E. M.* [et al.]. Status of research toward the ITER disruption mitigation system // *Phys. Plasmas*. 2022. V. 22: 021802.
2. *Pustovitov V. D.* Plasma stability theory including the resistive wall effects // *J. Plasma Phys.* 2015. V. 81(6). 905810609.
3. *Portone A.* The stability margin of elongated plasmas // *Nucl. Fusion*. 2005. V. 45. P. 926.
4. *Ludwig G. O.* [et al.]. Eddy currents in the vacuum vessel of the ETE spherical tokamak // *Nuclear Fusion*. 2005. V. 45. P. 675.
5. *Hözl M.* [et al.]. Coupling JOREK and STARWALL codes for non-linear resistive-wall simulations // *J. Phys. Conf. Ser.* 2012. V. 401: 012010.
6. *Пустовитов В. Д.* Расширение теории равновесия Шафранова на описание срывов тока при учете диссипации в резистивной стенке в токамаках // *Физика плазмы*. 2019. Т. 45. № 12. С. 1088–1102.
7. *Пустовитов В. Д., Чукашев Н. В.* Аналитическое решение внешней задачи равновесия плазмы эллиптического сечения в токамаке // *Физика плазмы*. 2021. Т. 47. № 10. С. 876–886.

УДК 621.039.634

### Расчет полей температур энергонапряженных компонентов панели первой стенки модуля № 7 тип А бланкета ИТЭР

*С. А. Козлов<sup>1</sup>, С. Н. Томилов, И. И. Поддубный, М. Н. Свириденко, А. Б. Путрик<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>АО «НИКИЭТ»

<sup>2</sup>Проектный центр ИТЭР

В рамках реализации соглашения о поставке теплонапряженных панелей первой стенки бланкета ИТЭР, специалистами АО «НИКИЭТ» выполнено комплексное расчетное обоснование конструкции панели первой стенки (ППС). ППС является теплонапряженным компонентом системы бланкета, обращенным к плазме, и механически зафиксирована на защитном блоке с помощью системы крепления. Обращенная к плазме часть ППС (далее пальцы) подвергаются воздействию теплового потока с плотностью до 4,7 МВт/м<sup>2</sup>.

Пальцы представляют собой трехслойную конструкцию, включающую несущий стальной корпус, бронзовый теплопроводящий слой и бериллиевое защитное покрытие.

Объектом исследования является ППС № 7 тип А, расположенная на верхнем своде вакуумной камеры (рис. 1).

Тепловой расчет проводился с использованием многофункционального расчетного кода ANSYS APDL. Расчетная модель включает в себя часть НКПС, две пары пальцев, систему крепления и представлена на рис. 2. Элементы ППС моделировались с использованием элемента solid70, ядро потока теплоносителя с помощью fluid116, а связь между стенкой тракта охлаждения и ядром — SURF152. Тепловой интерфейс между различными элементами конструкции был осуществлен при помощи контактных пар, состоящих из элементов target170 и conta174, в которых задавалась соответствующая контактная термическая проводимость.

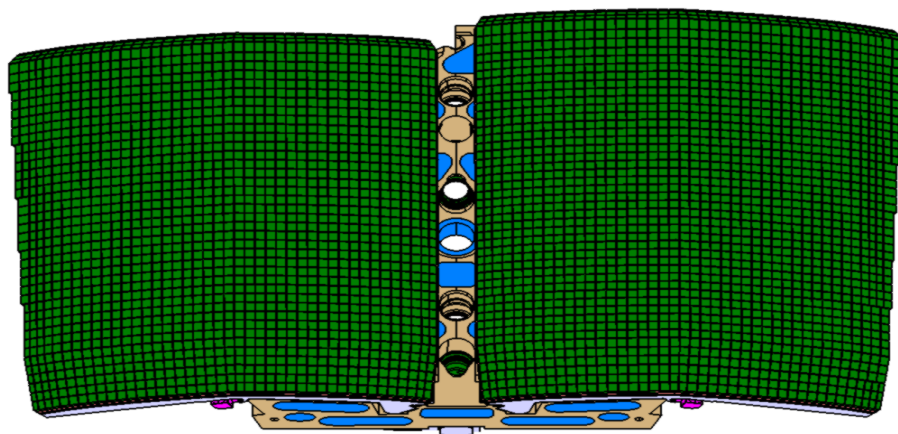


Рис. 1. ППС № 7 тип А, вид со стороны плазмы

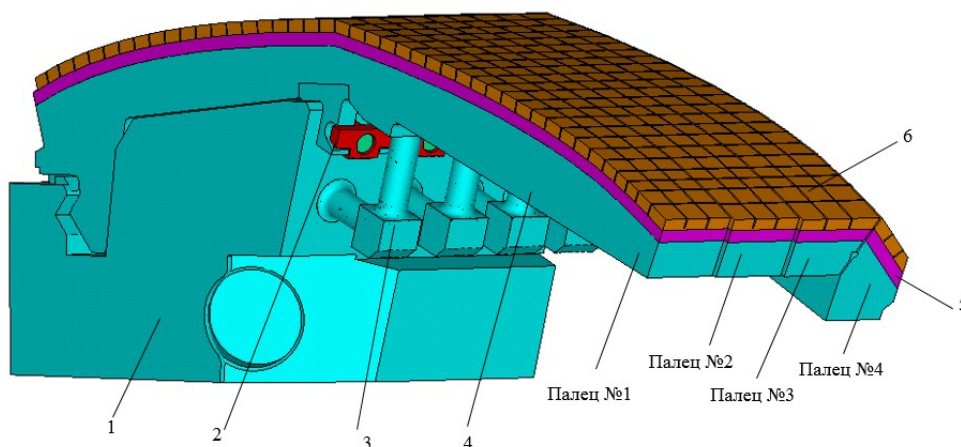


Рис. 2. Расчетная модель: 1 — фрагмент НКПС; 2 — система крепления пальцев; 3 — патрубки подвода/отвода теплоносителя; 4 — корпус пальца; 5 — теплопроводящий слой; 6 — бериллиевое покрытие

Расход теплоносителя в тракте пары пальцев принят  $0,45625 \text{ кг/с}$ , а температура теплоносителя на входе  $70 \text{ }^\circ\text{C}$  при давлении  $4 \text{ МПа}$ . Объемное энерговыделение в элементах конструкции соответствует режиму работы ИТЭР Inductive I. Профиль теплового потока представлен на рис. 3.

Рассмотрено 4 варианта распределения теплового потока по поверхности ППС, обращенной к плазме:

- 1) равномерный тепловой поток  $0,7 \text{ МВт/м}^2$  по всей поверхности пальцев, обращенной к плазме;
- 2) пиковый тепловой поток  $4,7 \text{ МВт/м}^2$  по всей поверхности пальцев, обращенной к плазме;
- 3) равномерный тепловой поток  $0,7 \text{ МВт/м}^2$  на пальцах № 1 и № 2 и пиковый тепловой поток  $4,7 \text{ МВт/м}^2$  на пальцах № 3 и № 4;
- 4) равномерный тепловой поток  $0,7 \text{ МВт/м}^2$  на пальцах № 3 и № 4 и пиковый тепловой поток  $4,7 \text{ МВт/м}^2$  на пальцах № 1 и № 2.

Значения коэффициентов теплоотдачи для различных участков тракта охлаждения рассчитаны с использованием критериальной зависимости Sider-Tate.

В данной работе представлены результаты расчета полей температур в нестационарной постановке для регулярной и нерегулярной пар пальцев, расположенных в периферийной части панели, подогрев теплоносителя в условиях равномерного теплового потока, а также в условиях пиковых тепловых нагрузок.

Полученные результаты подтверждают работоспособность энергонапряженных компонентов ППС в рассматриваемых режимах работы установки ИТЭР. Подогревы теплоносителя в вариантах № 1–4 составили: 33°C, 71°C, 51°C и 52°C соответственно. Температуры стальных элементов конструкции не превышают допустимую температуру 450°C во всех рассмотренных вариантах. Температура бронзового слоя превышает допустимую 350°C в 4-м варианте и составляет 413 °C. В варианте расчета №2 в тракте охлаждения возможно достижение кризиса теплообмена 1-го рода ввиду превышения плотности критического потока, рассчитанного по формуле Tong-75.

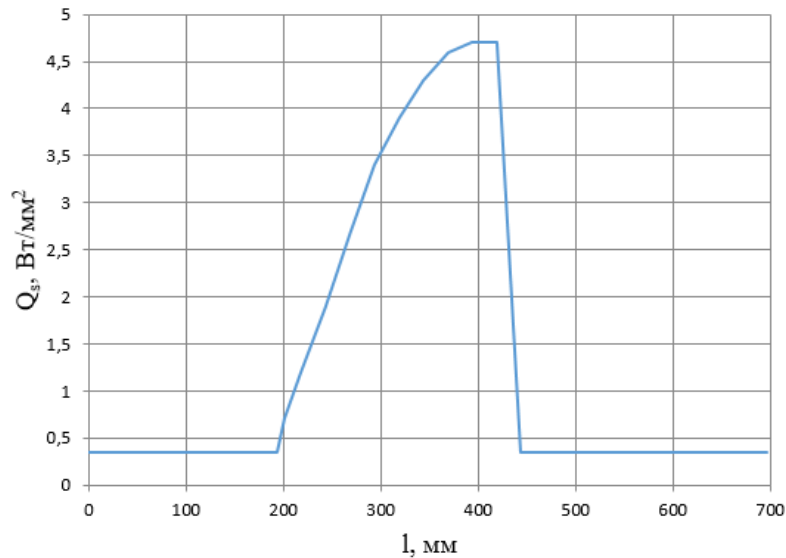


Рис. 3. Профиль пикового теплового потока, Вт/мм<sup>2</sup>

Максимумы температур в бериллиевом защитном покрытии — в зонах приложения пиковой тепловой нагрузки, однако перегрев носит локальный характер, и превышение допускаемой температуры, равной 660 °C, наблюдается менее чем на 5% поверхности бериллиевом покрытии пальцев.

УДК 533.9.08

### Развитие диагностического комплекса для измерения нейтронного излучения термоядерной D-D плазмы на установке МК-200

*Д. А. Бурмистров<sup>1,2</sup>, В. В. Гаврилов<sup>2</sup>, А. А. Жарова<sup>2</sup>, С. Д. Лиджигорьев<sup>2,3</sup>, Д. А. Топорков<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский университет МЭИ

<sup>2</sup>ГНЦ РФ «Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»

<sup>3</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время на базе установки МК-200 ведется создание DD нейтронного источника, состоящего из двух встречно направленных импульсных ускорителей и камеры взаимодействия (плазмотрода) [1]. Установка способна генерировать импульсные потоки плазмы длительностью 10–15 мкс с энергией направленного движения ионов в несколько кэВ, общим энергосодержанием до 100 кДж. С помощью многовитковых соленоидов в плазмотроде создается квазистационарное магнитное поле с индукцией от 1 до 3 Тл к центру лайнера.

Целью данной работы является развитие диагностического комплекса для измерения полного выхода, интенсивности и углового распределения нейтронного излучения. Для этого используются сцинтилляционные детекторы с кристаллом стибьена, активационные детекторы, а также нейтронные коллиматоры из литированного полиэтилена.

Детекторы были откалиброваны на импульсных нейтронных генераторах с энергией нейтронов 2,5 и 14 МэВ.

Полный нейтронный выход измерен с помощью детектора активационного типа [2], который представляет собой блок замедлителя из парафина, внутри которого находятся четыре счетчика Гейгера СТС-6, обернутые серебряной фольгой толщиной 0,25 мм. Положение детектора указано на рис. 1.

Для измерения протяженности и положения зоны излучения нейтронов разработаны 5 малогабаритных активационных детекторов. Замедлителем в этих детекторах является полиэтилен. Детекторы собраны на основе счетчиков СБТ-10А (в каждом активационном детекторе по 10 счетчиков). В качестве активационного материала используется индий, толщиной 2 мм. По результатам проведенных экспериментов протяженность нейтронного источника составляет от 1 до 1,5 м в зависимости от напряжения на конденсаторной батарее. Положение зоны излучения может регулироваться режимами работы плазменных ускорителей.

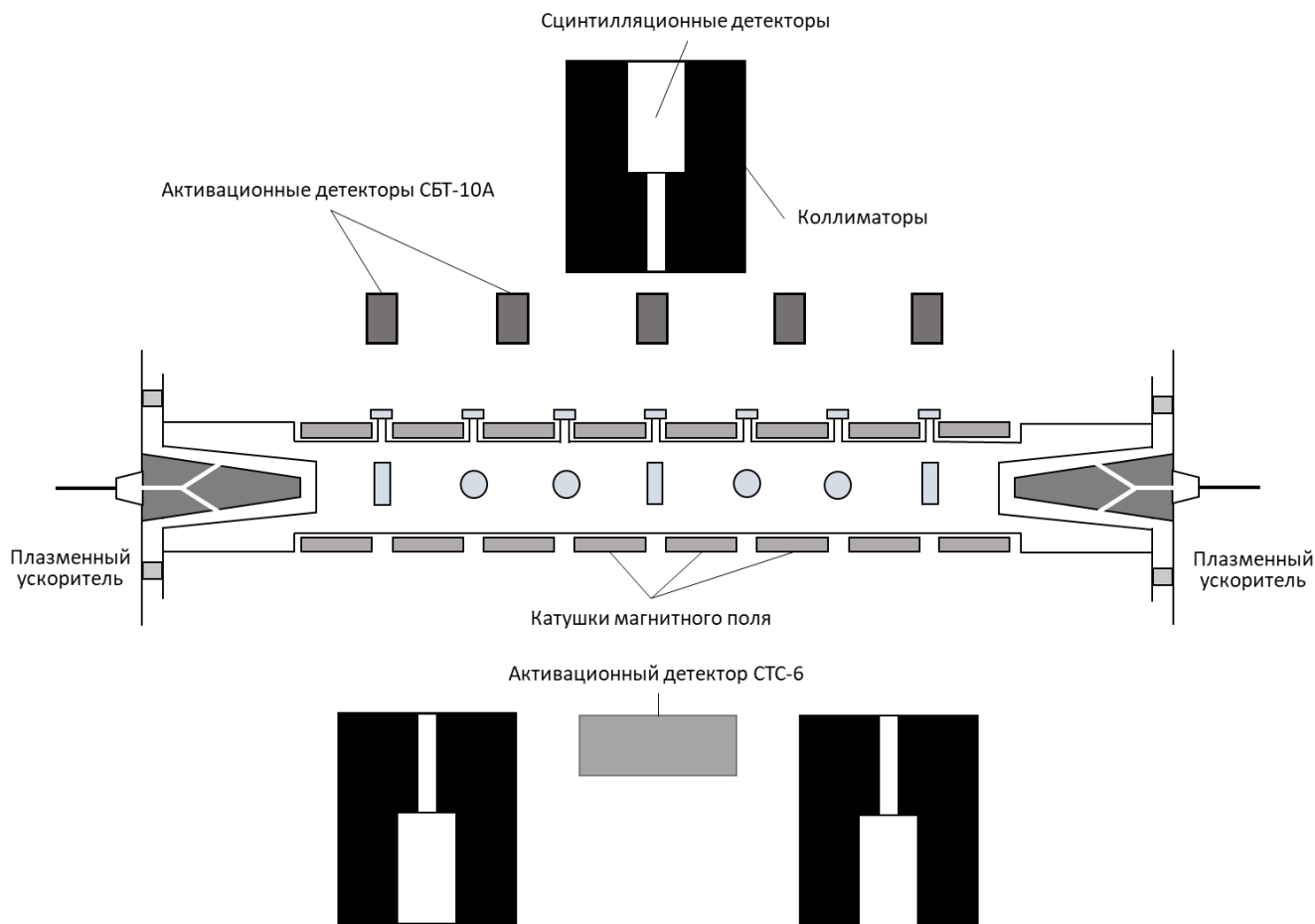


Рис. 3. Схема установки МК-200 (ТРИНИТИ)

Нейтронные коллиматоры представляют из себя полиэтиленовый (Li 5 об. %) блок 800×700×500 мм с коллимационным каналом  $\varnothing 5$  см, в которые устанавливаются сцинтилляционные детекторы с монокристаллом стибена. Коэффициент коллимации для нейтронного потока, не попавшего в телесный угол, составляет 10. Схематичное расположение коллиматоров показано на рис. 1.

В ходе экспериментов по сигналам сцинтилляционных детекторов измерены интенсивности нейтронного излучения в зависимости от напряжения на конденсаторной батарее, питающей плазменные ускорители, и от количества газа в его межэлектродном пространстве.

Согласно полученным данным полный нейтронный выход лежит в диапазоне  $10^9 \div 10^{10}$  нейтронов за импульс при напряжении на батарее 20–26 кВ.

Работа выполнена в рамках КП РТТН Государственный контракт № Н.4к.241.09.22.1074 28.04.2022.

### Литература

1. Кругляков Э. П. Мощные генераторы нейтронов // Прикладная механика и техническая физика. Т. 38. № 4. С. 77–89.

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. Сер. Термоядерный синтез. 2012. Т. 35(1). С. 23–30.

УДК 533.922

## Защита вольфрама от воздействия мощных потоков водородной плазмы слоем легкоплавкого материала с высоким зарядовым числом

С. Д. Лиджигорьев<sup>1,2</sup>, В. А. Барсук<sup>1</sup>, Д. А. Бурмистров<sup>1,3</sup>, В. В. Гаврилов<sup>1</sup>,  
И. М. Позняк<sup>1,2</sup>, А. В. Пушина<sup>1,2</sup>, Д. А. Топорков<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ГНЦ РФ «Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет МЭИ

Исследование взаимодействия плазмы с обращенными к плазме элементами термоядерных установок, в частности с дивертором, является одной из наиболее актуальных задач при реализации управляемого термоядерного синтеза. В международном термоядерном реакторе ИТЭР защитное покрытие диверторных пластин будет изготовлено из вольфрама [1]. Эрозия защитных покрытий под действием экстремальных тепловых потоков может сопровождаться не только поступлением тяжелых примесей в горячую плазму, но и сокращением срока службы дивертора. Однако взаимодействие мощных плазменных потоков с твердотельными материалами сопровождается эффектом «паровой экранировки». Эффект заключается в том, что в результате испарения и ионизации материала мишени перед облучаемой поверхностью образуется плотный слой мишени плазмы, который экранирует поверхность от прямого воздействия плазменного потока [2]. Преобразование энергии налетающего на мишень плазменного потока в излучение в экранирующем слое приводит к значительному снижению тепловой нагрузки на поверхность. Учет этого эффекта необходим для правильной оценки эрозии материала дивертора. Экспериментальные данные, полученные при исследовании эффекта экранировки, могут быть использованы для верификации расчетно-теоретических моделей, описывающих поведение защитных покрытий под действием интенсивных плазменных потоков в условиях ИТЭР [3].

Наличие тонкого слоя легкоплавкого материала на поверхности вольфрама может не только увеличить ресурс дивертора, но и повысить его устойчивость к возникновению трещин — основному механизму разрушения вольфрама при импульсных тепловых нагрузках, лежащих ниже порога плавления [4]. В данной работе проведено исследование воздействия мощного потока водородной плазмы, генерируемого импульсным ускорителем МК-200, на вольфрамовую мишень с предварительно напыленным слоем легкоплавкого материала с высоким зарядовым числом — висмутом.

На рис. 1 представлена схема эксперимента на установке МК-200 (ГНЦ РФ ТРИНИТИ). Импульсный плазменный ускоритель (1) создает водородный плазменный поток (2), скорость которого составляет  $(4\div 6) \cdot 10^7$  см/с, а энергосодержание  $\approx 50$  кДж. Поток с плотностью ионов  $(2\div 4) \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup> и диаметром  $\approx 8$  см движется в направлении мишени (4) в продольном магнитном поле с индукцией до 2 Тл, создаваемом соленоидами (3) и взаимодействует с вольфрамовой мишенью с размерами  $3 \times 3$  см, а также с мишенью, на фронтальную поверхность которой был вакуумно напылен висмут толщиной 20 мкм. Длительность плазменного потока, генерируемого ускорителем, составляет  $\approx 15$  мкс.

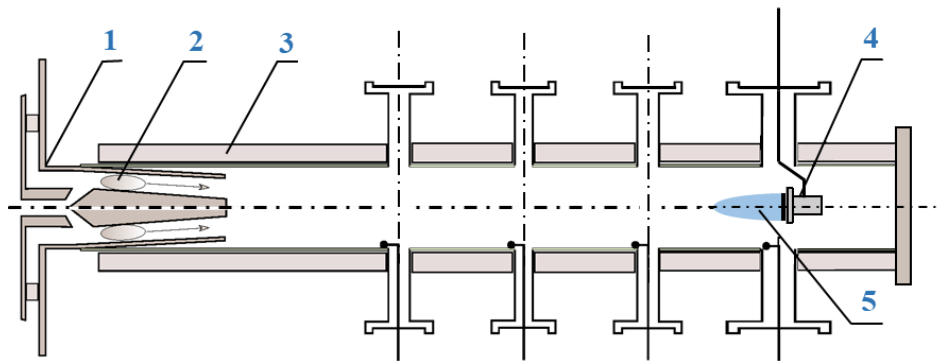


Рис. 1. Схема установки МК-200 для исследования взаимодействия плазменного потока с мишенями: 1 — импульсный плазменный ускоритель; 2 — ускоряемая плазма; 3 — соленоиды (магнитное поле  $1 \div 2$  Тл); 4 — облучаемая мишень; 5 — мишенная плазма

Изображения плазмы, образующейся при взаимодействии водородного плазменного потока с мишенями, в ВУФ-МР диапазонах длин волн регистрировалось многокадровой МКП-камерой с экспозицией кадров 40 нс. Для регистрации спектров излучения примешенной плазмы в диапазоне длин волн  $1 \div 30$  нм использовался спектрометр с пропускающей дифракционной решеткой ( $d = 500$  нм) и многокадровой МКП-камерой. Энергия, поглощаемая мишенями, измерялась термодинамическим калориметром. Для определения динамики температуры фронтальной поверхности мишеней применялся трехволновый инфракрасный пирометр.

Результаты спектральных измерений в экспериментах с вольфрамовой мишенью, покрытой слоем висмута, демонстрируют наличие в спектрах излучения ионов висмута в диапазоне  $1 \div 30$  нм. ВУФ-МР свечение плазмы висмута локализовано вблизи поверхности мишени на расстояниях  $< 3$  см. Полученные с помощью инфракрасного пирометра данные показали, что максимальная температура поверхности вольфрама с висмутом во время воздействия водородной плазмы на мишень достигала  $\approx 1900$  К, что находится вблизи температуры кипения висмута ( $\approx 1837$  К), но существенно ниже температуры плавления вольфрама ( $\approx 3695$  К). Согласно калориметрическим измерениям, паровая экранировка висмута более чем на порядок эффективней паровой экранировки вольфрама: плотность поглощенной мишенью энергии снижается с  $48$  Дж/см<sup>2</sup> до  $4$  Дж/см<sup>2</sup>. Эрозия висмута за один импульс при этом составляет  $\approx 1,5$  мкм.

### Литература

1. *Pitts R. A.* [et al.]. Physics basis for the first ITER tungsten divertor // Nucl. Mater. Energy. 2019. V. 20: 100696.
2. *Pestchanyi S., Pitts R. A., Safronov V.* Validation of TOKES vapor shield simulations against experiments in the 2MK-200 facility // Fusion Eng. Des. 2017. V. 124. P. 401–404.
3. *Pshenov A. A., Eksaeva A. A., Krashennnikov S. I., Marenkova E. D.* Vapor shielding of solid targets exposed to high heat flux // Physics Procedia. 2015. V. 71. P. 14–19.
4. *Климов Н. С.* [и др.]. Экспериментальное исследование формирования трещин на поверхности чистого вольфрама и вольфрама, покрытого тонким защитным слоем легкоплавкого металла, при плазменных тепловых нагрузках, характерных для переходных плазменных процессов в ИТЭР // Взаимодействие плазмы с поверхностью: Сб. науч. трудов XIX конф., Москва, 28–29 января 2016 г. — М.: НИЯУ МИФИ, 2016. С. 96–98.

УДК 533.952

### Измерение азимутального распределения магнитного поля Z-пинча в многопроволочных сборках на установке «Ангара-5-1» при помощи магнитных зондов

*К. С. Бездетный*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ»,

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В физике плазмы существует множество различных диагностических методик по измерению магнитного поля — методики, основанные на эффекте Зеемана, Фарадея. Однако большую популярность приобрел именно метод магнитных зондов как наиболее простой контактный способ измерения магнитного поля в области расположения зонда. Магнитозондовая диагностика плазмы позволяет определить

значение магнитного поля в заданной точке в любой момент времени в МПЛ (многопроволочный лайнер) на установке «Ангара-5-1» в ГНЦ РФ ТРИНИТИ. Если предположить, что проволочная сборка сжимается симметрично, то, измерив значения поля всего в одной точке, можно определить величину тока, проникшего внутрь данного радиуса в различные моменты времени. Это важная характеристика для исследования имплозии лайнера. Однако в действительности лайнер сжимается несимметрично по радиусу и азимуту, поэтому в эксперименте следует использовать большое количество зондов, учитывая малые размеры проволочной сборки и влияния зонда на плазму. В данной работе в каждом эксперименте была использована сборка из 8 магнитных датчиков, расположенных эквидистантно по окружности.

Основываясь на экспериментах, проведенных ранее на установке «Ангара-5-1», была разработана методика измерения азимутального распределения магнитного поля Z-пинча в различные моменты времени сжатия многопроволочной сборки. В рамках этого представляет интерес также зарегистрировать и измерить в эксперименте амплитуду модуляции магнитного поля. Конструкция чувствительного элемента магнитного зонда состояла из петли диаметром 300÷800 мкм, защищенной NbTi-экраном. Для уменьшения поперечного сечения магнитного датчика по отношению к набегающему потоку плазмы (возмущения плазмы датчиком) была выбрана плоская геометрия оболочки зонда. Учитывая ограничения на максимально допустимый размер датчика, обусловленные размером скин-слоя токонесущей плазмы для установки «Ангара-5-1», размер зондов составил 1÷1,5 мм. Важным фактором при измерении магнитного поля, которое должно успеть продиффундировать из плазмы, обтекающей зонд, внутрь оболочки зонда, является также вмороженность магнитного потока в плазму лайнера. Учитывая время диффузии магнитного поля из плазмы, обтекающей зонд, внутрь оболочки, было рассчитано временное разрешение зонда, которое составило 1 нс. Калибровка зондов проводилась при помощи катушки Гельмгольца с эталонной петлей, размеры которой были точно известны. Экспериментально было измерено азимутальное распределение магнитного поля для МПЛ диаметром 2,5 см с числом проволок 40 и 24 и массой сборки 220 мкг/см и 132 мкг/см соответственно. В качестве материала проволок использовался вольфрам.

### Литература

1. *Митрофанов К. Н.* [и др.]. Об особенностях применения магнитозондового метода диагностики высокотемпературной плазмы // Приборы и техника эксперимента. 2018. № 2. С. 78–99.
2. *Глазырин И. В.* [и др.]. Измерение магнитных полей внутри плазмы сжимающихся лайнеров при потоках мощности ~1 ТВт/см<sup>2</sup> // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2009. Вып. 2. С. 67–82.
3. *Спитцер Л.* Физика полностью ионизированного газа: пер. с англ. — М.: ИИЛ, 1957.

УДК 621.039.6

### Оценка температурного поля в сборке гибкой опоры внутреннего blankets реактора ИТЭР при разрушении электроизоляционного покрытия

**Б. И. Никулин<sup>1,2</sup>, И. И. Поддубный<sup>1</sup>, М. Н. Свириденко<sup>1</sup>, И. В. Данилов<sup>1</sup>, А. Б. Путрик<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Научно-исследовательский и конструкторский институт энерготехники им. Н. А. Доллежала

<sup>2</sup>Национальный исследовательский университет «Московский энергетический институт»

<sup>3</sup>Проектный центр «ИТЭР»

Защитный blanket реактора ИТЭР состоит из 440 модулей blankets (МБ), каждый из которых механически закреплен на вакуумной камере (ВК) с помощью четырех сборок гибких опор (ГО), главным элементом которых является гибкий картридж. Он представляет собой полый цилиндр внешним диаметром 140 мм с двумя фланцами. Нижний соединяется с корпусом ВК, верхний — с защитным блоком (ЗБ) МБ с помощью болта и конической гайки через втулку. Центральная часть картриджа является гибкой и перфорирована сквозными прорезями, образующими ряд спиц длиной 130 мм, расположенных по окружности, благодаря чему обеспечивается прочность в осевом и гибкость в поперечном направлениях. Для обеспечения электрической изоляции ГО от ВК используется электроизолирующее покрытие (ЭИП) на основе оксида алюминия.

Оценка температурного поля картриджа ГО в аварийном режиме эксплуатации, когда произошло разрушение электроизоляции ГО, производилась в пять этапов с помощью программного комплекса ANSYS Mechanical APDL.

На первом этапе были получены температурные поля сборки ГО в режиме Inductive I, представляющим собой периодическую последовательность режимов горения плазмы длительностью 450 с



с максимальным энерговыделением, обусловленным нейтронным потоком, и паузы длительностью 1800 с с нулевым энерговыделением. За начальное условие принималось однородное распределение температур, равное 100 °С. В качестве граничных условий на резьбовой поверхности ВК задавалась постоянная температура 100 °С, в ЗБ — 130 °С. Помимо этого, учитывалась контактная термическая проводимость на поверхностях деталей сборки ГО. Результаты моделирования представлены на рис. 1.

На втором этапе производился расчет напряженно-деформированного состояния ГО при следующих шагах нагружения, накладываемых последовательно друг на друга: предварительное усилие затяга болта ГО — 600 кН при 20 °С; равномерный разогрев сборки ГО до 100 °С; приложение температурных полей, соответствующих окончанию паузы и горения; поперечное смещение МБ на 1,6 мм и его разворот на 1,5 мрад; осевая сжимающая сила 600 кН. Последние три шага обусловлены действиями электромагнитных сил при срывах плазмы типа Slow VDE III при величине электрического тока, наведенного в МБ, 137 кА. Затяг болта ГО падает до 504 кН, что при действии растягивающей электромагнитной силе 600 кН приводит к раскрытию стыка на интерфейсе «коническая втулка–картридж» и возможному разрушению ЭИП при циклическом режиме работы реактора и последующему аварийному режиму работы blankets, когда ток пойдет через опору.

На третьем этапе в месте раскрытия стыка создавалась контактная пара, имитирующая поверхность, через которую проходит ток величиной 137 кА, и проводился электрический расчет с целью получения поля джоулева тепловыделения в картридже ГО. По значению джоулево тепловыделение на 4 порядка превосходит нейтронное.

На четвертом этапе производился расчет температурного поля ГО при разрушении ЭИП. За начальное условие принималось поле температур, характерное для режима горения Inductive I. Вычисленное на предыдущем этапе джоулево тепловыделение прикладывалось в течение 300 мс (время события Slow VDE III), после чего снималось и анализировалось остывание картриджа за счет механизма теплопроводности. Максимальная температура в картридже достигает 965 °С. При этом охлаждение до рабочих температур происходит за 2250 с.

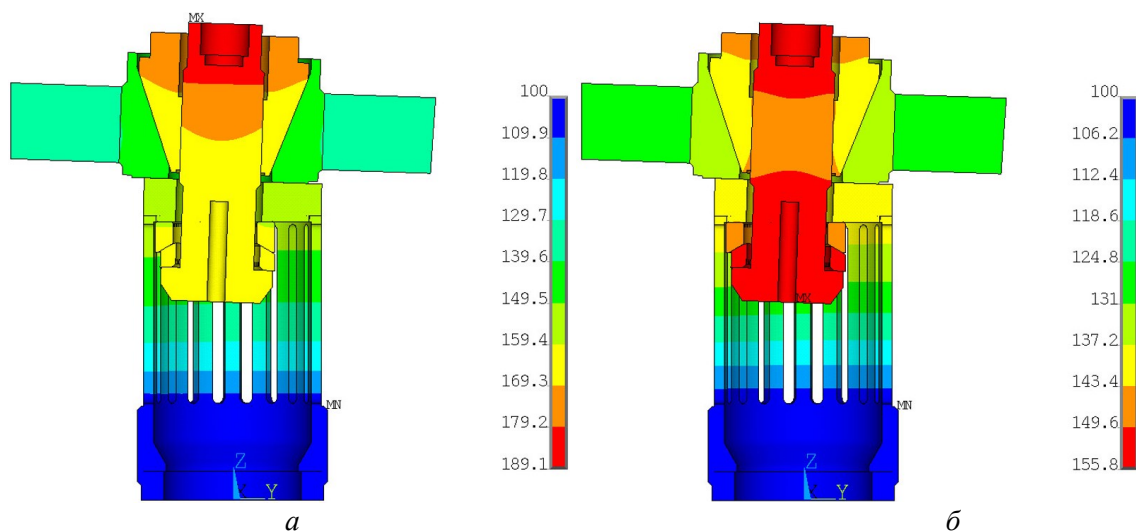


Рис. 1. Установившиеся температурные поля, °С: *a* — режим импульса; *б* — режим паузы

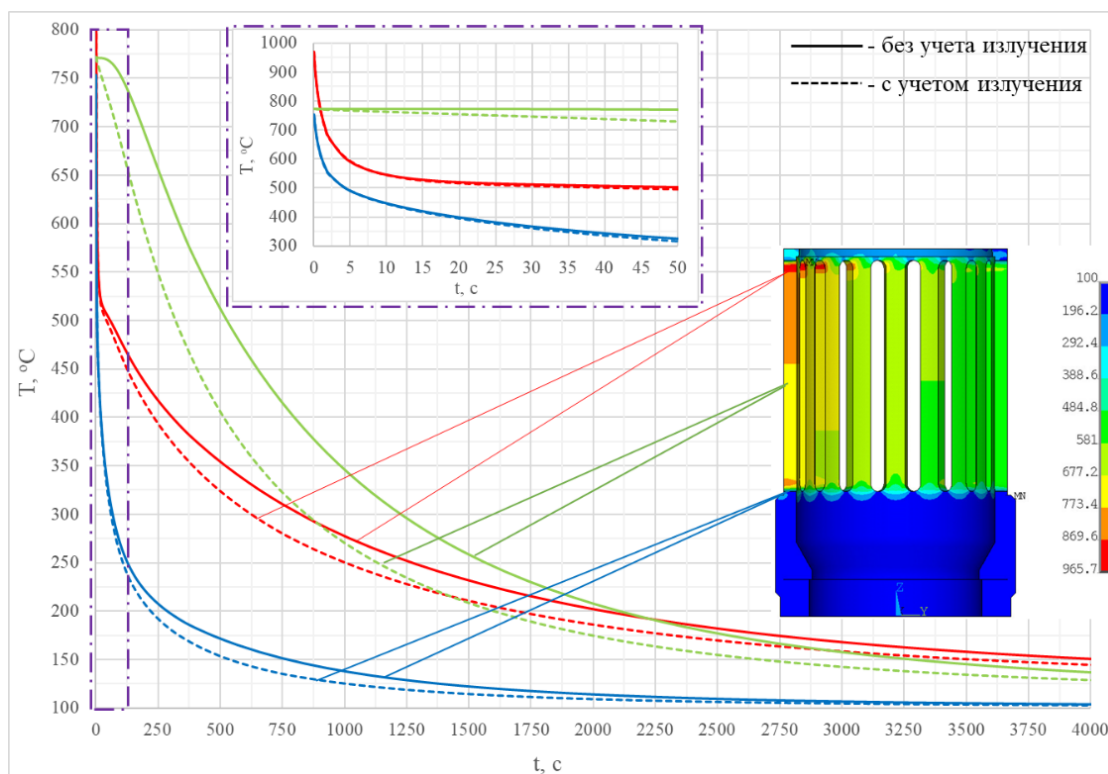


Рис. 2. Остывание картриджа с учетом излучения и без его учета

Вследствие высоких температур на пятом этапе была проведена оценка влияния лучистого теплообмена между компонентами сборки ГО, а также между картриджем и ВК, имеющей температуру 100  $^{\circ}\text{C}$ , на темп остывания картриджа. На рис. 2 представлен график изменения температуры картриджа со временем в некоторых его характерных точках с учетом теплопереноса излучением и без его учета. Остывание картриджа до эксплуатационных температур происходит за 1500 с. Несмотря на то, что время остывания существенно уменьшилось, оно все еще остается значительным.

Высокие температуры в течение длительного времени приводят к действию значительных термических напряжений, которые, в свою очередь, могут привести к потере несущей способности картриджа, деградации теплофизических и механических свойств, эффектам ползучести и т. д. Поэтому необходимо увеличить минимально возможное предварительное усилие затяга болта до величин, заведомо обеспечивающих условие нераскрытия стыка на интерфейсе «коническая втулка–картридж», во избежание протекания электрического тока по картриджу ГО.

УДК 533.922

### **Разработка и применение быстрого трехканального инфракрасного пирометра для измерения температуры поверхности вольфрамовой мишени в процессе взаимодействия с мощными потоками водородной плазмы**

*А. В. Пушина<sup>1,2</sup>, Д. А. Бурмистров<sup>1,3</sup>, С. В. Карелов<sup>1</sup>, С. Д. Лиджигоряев<sup>1,2</sup>, И. М. Позняк<sup>1,2</sup>, Д. А. Топорков<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>ГНЦ РФ «Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет МЭИ

Успешная реализация проекта ИТЭР 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, в частности, о температуре на поверхности защитных покрытий [1]. Существующие токамаки не обеспечивают плазменно-тепловые нагрузки, ожидаемые в ИТЭР, поэтому для испытаний материалов применяют плазменные ускорители, электронные пучки, лазеры и т. д. Традиционными средствами измерения температуры

материалов являются термопары, термосопротивления, а также оптические пирометры. Последние отличаются своим быстродействием, не влияют на объект исследования и позволяют измерять высокие температуры, более 2000 К. В связи с этим методы измерения температуры нагретых тел по спектру их теплового излучения являются наиболее предпочтительными и широко применяются на практике [2].

Цель данной работы — исследовать динамику температуры поверхности вольфрамовой мишени при воздействии мощного плазменного потока на установке МК-200 (ГНЦ РФ ТРИНИТИ). Измерения температуры проводились методом инфракрасной пирометрии. Для этого был разработан трехканальный пирометр. В работе приводится схема пирометра, результаты измерений динамики температуры мишени, результаты численного моделирования прогрева материала тепловым импульсом и сравнение полученных результатов.

Схема экспериментов на установке МК-200 представлена на рис. 1. Установка состоит из импульсного плазменного ускорителя, плазмопровода длиной 3 м и мишенной камеры. Источником питания ускорителя является конденсаторная батарея емкостью  $\approx 1$  мФ. В качестве плазмообразующего газа использовался водород. Плазмопровод и мишенная камера заполнены продольным магнитным полем с индукцией, нарастающей от 1 Тл вблизи ускорителя до 2 Тл в мишенной камере.

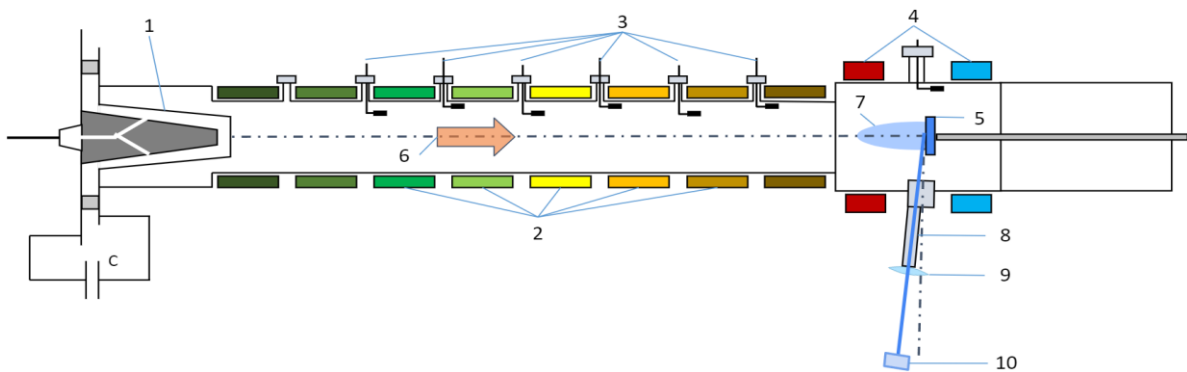


Рис. 1. Схема установки МК-200 для исследования динамики температуры поверхности мишени: 1 — импульсный плазменный ускоритель; 2 — катушки магнитного поля; 3 — магнитные зонды; 4 — катушки Гельмгольца; 5 — вольфрамовая мишень; 6 — плазменный поток; 7 — мишенная плазма; 8 — система патрубков; 9 — линза; 10 — пирометр

Основные параметры плазменного потока, создаваемого установкой МК-200, представлены в табл. 1. 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. В данной работе облучение вольфрамовой мишени проводилось при напряжении на конденсаторной батарее 16 кВ и времени напуска рабочего газа в межэлектродный зазор ускорителя 270 мкс.

Т а б л и ц а 1. Параметры плазменного потока установки МК-200

Длительность импульса	$\Delta t = 15$ мкс
Скорость потока плазмы	$V \approx (4 \div 6) \cdot 10^7$ см/с
Плотность ионов	$n \approx (2 \div 4) \cdot 10^{15}$ см $^{-3}$
Диаметр потока	$d \approx 8$ см
Энергосодержание	$Q \approx 50$ кДж

На рис. 2 представлены результаты сравнения прямого измерения температуры поверхности вольфрамовой мишени с результатами численного моделирования. Расчеты были выполнены для вольфрамовой мишени с параметрами, характерными для условий эксперимента. В качестве тепловой нагрузки на материал была использована максимальная плотность поглощенной энергии в центре облучаемой мишени  $Q = 55$  Дж/см $^2$ , в качестве формы задаваемого импульса мощности — сигнал с магнитного зонда, который находился в мишенной камере установки. В начальный момент времени ( $t=0$ ) температура образца соответствует комнатной (293 К), затем наблюдается нагрев поверхности до 5600 К за 6 мкс, после этого происходит медленное остывание мишени. На графике видна область, где температура меняется слабо (14–24 мкс), что связано с процессом кристаллизации вольфрама. Увеличение температуры после 24 мкс происходит из-за нагрева мишени хвостовой частью плазменного потока. В эксперименте

температура возрастает и спадает быстрее, чем при моделировании. Вероятнее всего, это связано с тем, что форма теплового импульса, воздействующего на поверхность в эксперименте, отличается от задаваемого в модели. Решение в ближайшее время «обратной» задачи позволит восстановить форму импульса мощности тепловой нагрузки, приводящей к наблюдаемой в эксперименте динамике температуры поверхности вольфрама.

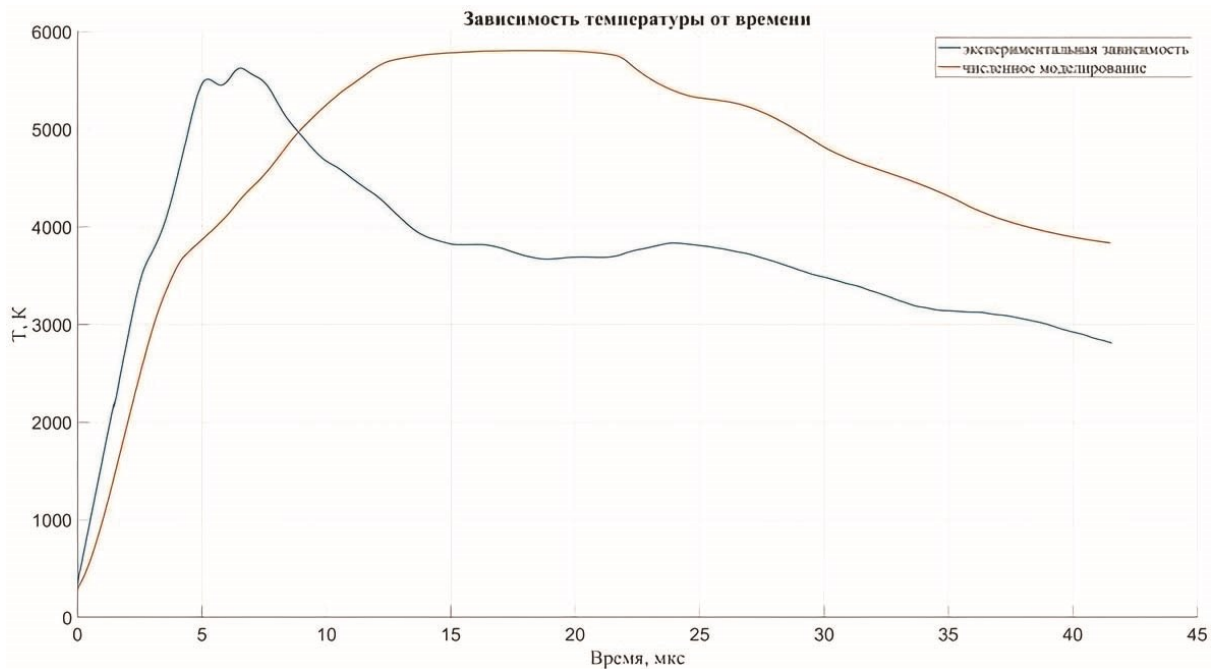


Рис. 2. Динамика температуры поверхности вольфрамовой мишени

### Литература

1. *Климов Н. С.* [и др.]. Воздействие интенсивных импульсных потоков плазмы на защитные материалы внутрикамерных компонентов термоядерного реактора // *Ядерная физика и инжиниринг*. 2010. Т. 1. № 3. С. 210–219.
2. *Магунов А. Н.* Спектральная пирометрия. — М.: Физматлит, 2012. С. 10.

УДК 004.942

### Исследование процесса инжекции рабочего газа в межэлектродный зазор плазменного ускорителя МК-200 X8

*Е.З. Бирюлин, В. Ю. Цыбенко, И. А. Алябьев, И. М. Позняк, З. И. Новоселова, Е. Д. Федулаев*

ГНЦ РФ «Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»  
Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Во время работы ИТЭР ожидается высокая плазменно-тепловая нагрузка на защитные покрытия вакуумной камеры реактора. При переходных плазменных процессах (ELMy и срывы) тепловая нагрузка на поверхность будет многократно превышать пороги плавления материалов защитных покрытий (бериллия и вольфрама), что может повлечь их интенсивную эрозию. Разрушение защитных пластин напрямую влияет на ресурс реактора, поэтому требует изучения. Для исследования деградации защитных покрытий необходимо в лабораторных условиях воспроизводить ожидаемые в ИТЭР плазменно-тепловые нагрузки. Так как на существующих токамаках данные нагрузки недостижимы, эксперименты по исследованию эрозии проводятся на плазменных ускорителях.

Параметры плазменно-тепловых воздействий существующих установок с импульсными ускорителями (МКТ, МК-200) близки к ожидаемым во время переходных процессов в ИТЭР по плотности, энергии ионов и тепловой нагрузке. За счет увеличения мощности импульсного ускорителя с применением соответствующего магнитопровода возможно добиться увеличения времени воздействия при сохранении величины тепловой нагрузки. Для этого необходимо дальнейшее развитие ускорительной техники. Улучшения могут быть направлены на увеличение эффективности использования энергии, запасенной в

источнике питания ускорителя (конденсаторных батареях), и эффективности использования плазмообразующего газа. Это может быть достигнуто за счет совершенствования системы инжекции рабочего газа в межэлектродный зазор.

В ГНЦ РФ ТРИНИТИ (Москва, Троицк) создается плазменный ускоритель нового поколения МК-200 X8 с модифицированной системой газонапуска. Газ впрыскивается в рабочий объем с помощью восьми быстродействующих клапанов в направлении от внешнего (анода) к внутреннему (катоде) электроду. Таким образом создается компактное газовое распределение вблизи поверхности центрального электрода. Согласно [1], такое распределение позволяет стабилизировать неустойчивость плазмы, обусловленную неравномерностью ее разгона по сечению межэлектродного зазора. Подавление неустойчивости позволяет увеличить энергоэффективность ускорителя, а также уменьшить дисперсию скоростей в плазменном сгустке на выходе электродов.

Целью данной работы являлось исследование процесса инжекции рабочего газа в межэлектродный зазор плазменного ускорителя МК-200 X8. Для этого в программном пакете Ansys CFD разработана численная модель, описывающая движение газа в межэлектродном зазоре (рис. 1). В основе модели лежит система уравнений Навье–Стокса для вязкой сжимаемой жидкости:

$$\rho \left( \frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \eta \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \zeta \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \delta_{ik} \right), \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_l}{\partial x_l} = 0.$$

Уравнения решались методом контрольных объемов (МКР) на деформируемой сетке (учитывалось открытие и закрытие клапана). Результаты численного моделирования представлены на рис. 1.

Для проверки достоверности численной модели были проведены измерения давления газа в межэлектродном зазоре ускорителя. Для измерения распределения давления вдоль катода была разработана диагностическая система на основе пьезорезистивных датчиков давления Keller PAA-8 L. Азимутальная неоднородность инжекции газа была измерена с помощью восьми датчиков PCB Piezotronics, установленных в «гребенке». Положение датчиков показано на рис. 1. Измерения позволили определить усредненные параметры потока газа вдоль центрального электрода: скорость, число Маха, плотность (табл. 1). Полученные экспериментальные данные близки к результатам численного моделирования.

В будущем планируется применить разработанную численную модель для оптимизации системы инжекции газа в межэлектродный зазор нового импульсного ускорителя: для подбора параметров клапана, расчета дефлекторов и сопел, а также для создания конструкции нового клапана. Дальнейшее развитие численной модели может быть направлено на создание гибридной схемы вычислений, которая использует не только уравнения сплошной среды, но и уравнения молекулярных потоков.

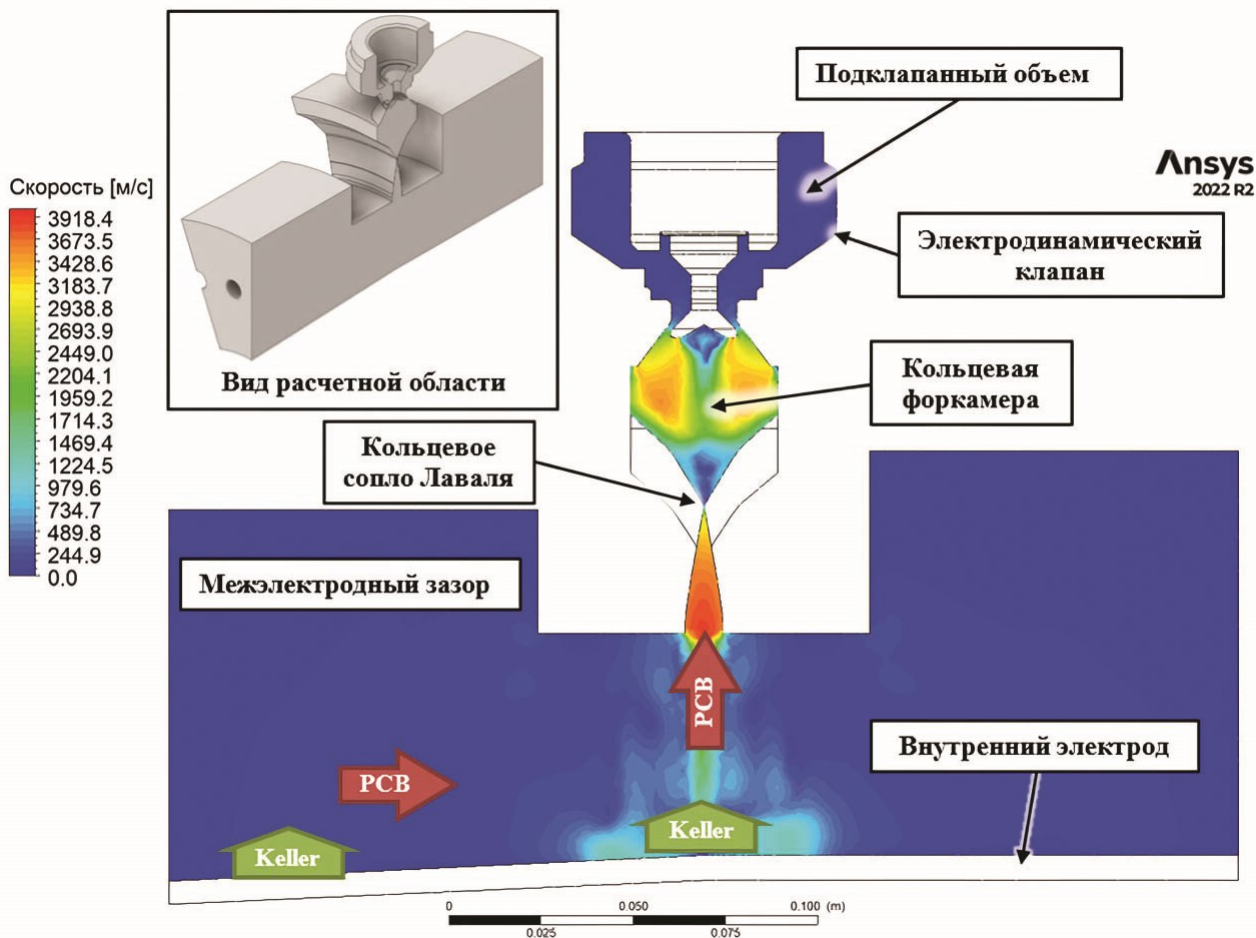


Рис. 1. Распределение скорости газа через 150 мкс от момента открытия клапана

Таблица 1. Сравнение экспериментальных данных параметров течения газа с расчетными

Параметр	Величина (оценка на основе эксперимента)	Величина (расчет)
Скорость газового потока	2660±230 м/с	~2400 м/с
Число Маха	4÷5	~3
Концентрация газа в камере в результате инъекции	$1,6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$	$\sim 1,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$
Масса инжектированного газа	1,1 г	~1 г

### Литература

1. Witherspoon F. D. [et al.], A contoured gap coaxial plasma gun with injected plasma armature // Rev. Sci. Instrum. 2009. V. 80(8): 083506. DOI: 10.1063/1.3202136.

## Автоматизированный метод выделения активного сигнала CXRS-диагностики

*А. А. Храпов<sup>1</sup>, В. А. Крупин<sup>2</sup>, М. Р. Нургалиев<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

В рамках работ по модернизации алгоритмов обработки экспериментальных данных CXRS-диагностики (активной перезарядочной спектроскопической диагностики) для токамака Т-15МД [1] в настоящей работе проведен анализ характеристик спектра в области линии  $\lambda = 5291 \text{ \AA}$  иона  $\text{C}^{5+}$ . Для анализа использовались экспериментальные данные, накопленные в период с 2015 по 2018 гг. на токамаке Т-10 [2] с помощью CXRS-диагностики.

Положительной особенностью CXRS-диагностики на диагностическом пучке является возможность осуществлять инъекцию периодически, что позволяет реализовать временную разностную схему. В этом случае возможно выделение активного сигнала как разность между суммарным (активным + пассивным) и пассивным. При этом кадры с активными сигналами несут в себе информацию о таких локальных характеристиках плазмы, как ионная температура, концентрация ядер  $\text{C}^{6+}$  и скорость вращения плазмы. При анализе спектра излучения из центральных областей активный сигнал будет иметь большее уширения (в следствие больших ионных температур), а регистрируемая камерой величина интенсивности будет больше за счет добавки локального свечения.

Поэтому в качестве параметров, подходящих для идентификации активного сигнала, были выбраны:

- превышение интенсивности линии в кадре по сравнению с соседними кадрами,  $\Delta I$ ;
- превышение ширины контура линии в кадре по сравнению с соседними кадрами,  $\Delta W$ .

Иллюстрация того, как данные параметры изменяются от кадра к кадру, представлена на рис. 1–2. Как можно видеть, кадры с инъекцией пучка атомов имеют большую интенсивность (см. рис. 1) и большую ширину контура (см. рис. 2). При этом  $\Delta I$  и  $\Delta W$  определяются с использованием временной разностной схемы.

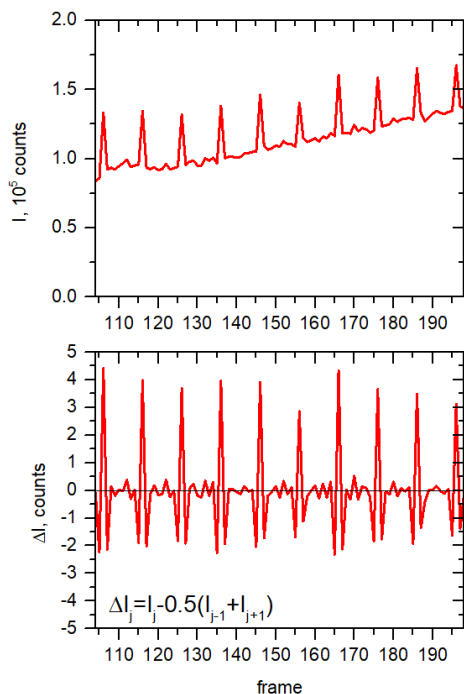


Рис. 1. Выделение активных кадров по величине интенсивности линий

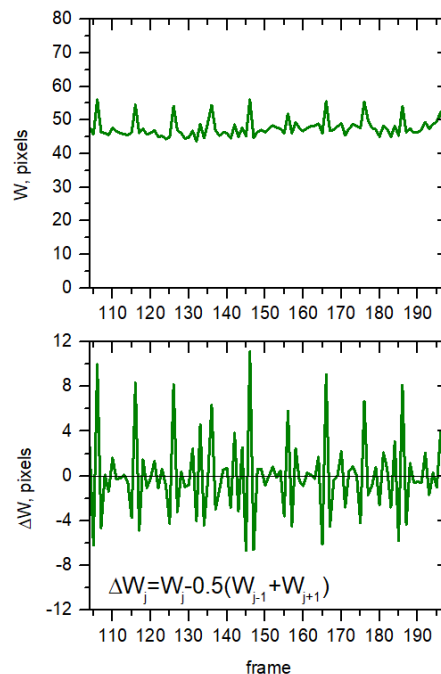


Рис. 2. Выделение активных кадров по величине ширины контура линий

Была проведена предварительная обработка данных: они были нормированы, а также из них были удалены отрицательные значения  $\Delta I$  и  $\Delta W$ , которые принципиально не могут соответствовать активным кадрам. Был разработан классификатор на основе таких методов машинного обучения, как метод опорных векторов (SVM) [3] и нейронная сеть (NN) при помощи программных пакетов scikit-learn и PyTorch

на языке Python. В методе опорных векторов в качестве ядра для скалярного произведения была задана функция  $x^3$ . Нейронная сеть состоит из двух линейных слоев, между которыми находится функция активации ReLU (полулинейный элемент).

На рис. 3 продемонстрировано распределение активных и пассивных кадров в зависимости от  $\Delta W$  и  $\Delta I$ , а также построена функция разделения, найденная при помощи SVM. Для нейросетевого классификатора, чтобы проиллюстрировать процесс его обучения, была рассчитана метрика точности, т. е. процент совпадений программных предсказаний с размеченными вручную классами; она представлена на рис. 4.

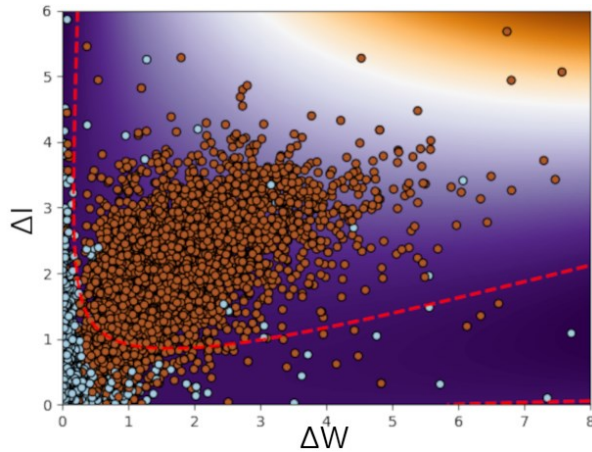


Рис. 3. Распределение активных и пассивных кадров в зависимости от нормированных  $\Delta W$  и  $\Delta I$ . Желтые точки — активные кадры, синие — пассивные. Штриховая линия — разделение классов методом опорных векторов

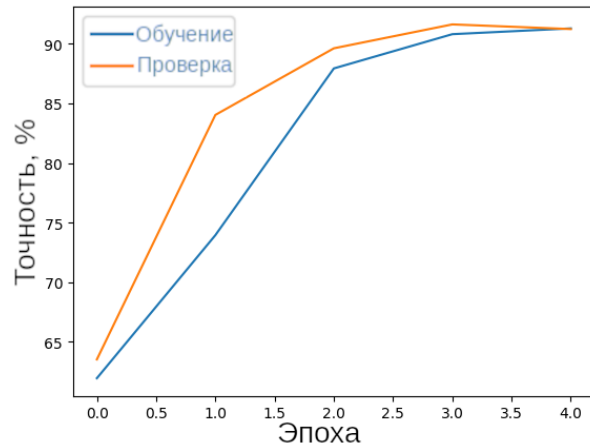


Рис. 4. Рост точности нейросетевого классификатора в зависимости от числа эпох обучения на 30% от набора данных

Отработанная методика позволит оперативно осуществлять предварительную разметку данных CXRS-диагностики токамака Т-15МД. Созданные программные модули в будущем планируется интегрировать во фреймворк для обработки CXRS-сигналов, который будет обеспечивать получение данных об ионной температуре, концентрации ядер легких примесей и скоростей вращения плазмы.

### Литература

1. *Krupin V.* [et al.]. The development of charge exchange recombination spectroscopy diagnostics for the T-15MD tokamak // *J. Instrum.* 2020. V. 15(2): 02027.
2. *Крупин В. А.* [и др.]. Модернизированная активная спектроскопическая диагностика (CXRS) токамака Т-10// ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2014. Т. 37. №4. С. 60–70.
3. *Cortes C., Vapnik V.* Support-vector networks // *Mach. Learn.* 1995. V. 20. №3. P. 273–297.
4. *Brownlee J.* Probability for machine learning: discover how to harness uncertainty with Python. — Machine Learning Mastery, 2020.

УДК 539.1.074.88

### Применение спектрометров для измерений потоков нейтронов в смешанных DD и DT полях

*Д. С. Фридрихсен<sup>1,2,3</sup>, Т. М. Кормилицын<sup>1,2</sup>, С. Ю. Обудовский<sup>2,3</sup>, Ю. А. Кацук<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Проектный центр ИТЭР

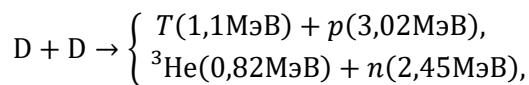
<sup>3</sup>ГНЦ РФ «Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»

В настоящее время наиболее перспективным способом осуществления управляемого термоядерного синтеза является использование установок типа токамак, которых в мире построено уже порядка сотен. Строящийся в настоящее время на юге Франции токамак-реактор ИТЭР (англ. — International Thermonuclear Experimental Reactor) станет крупнейшим среди действующих токамаков. Помимо этого, ИТЭР должен стать первым экспериментальным термоядерным реактором и одновременно тестовой



площадкой для целого ряда новейших технологий, необходимых для коммерческого производства электроэнергии на основе термоядерного синтеза.

На данный момент основными термоядерными реакциями синтеза на токамаках являются реакции с использованием дейтерия и трития (нейтроны, полученные в таких реакциях, принято называть соответственно DD- и DT-нейтроны):



Для реализации таких реакций необходим сильный нагрев топлива, при котором происходит ионизация и образуется плазма. Для ИТЭР планируется получение плазмы с ионной температурой  $15 \div 25$  кэВ. В этом диапазоне сечение DT-реакции на два порядка больше сечения DD-реакции (для  $E_D = 20$  кэВ  $\sigma_{DD} \sim 5 \cdot 10^{-4}$  барн, а  $\sigma_{DT} \sim 5 \cdot 10^{-2}$  барн). Поэтому в разрядах с  $n_T/n_D \sim 50 : 50$  можно ожидать, что количество рожденных в плазме DT-нейтронов будет в разы больше. Однако на пути к кампании с таким высоким топливным отношением будет проведен ряд разрядов в дейтериевой плазме в отсутствие или с малым содержанием трития. Ввиду того, что продуктом DD-реакции в одном из каналов является тритий, даже в сценариях без напуска трития в плазму, она станет источником некоторого количества быстрых DT-нейтронов. Поэтому в сценариях, характеризующихся этим переходным процессом, необходимо точно определять такие параметры, как нейтронный выход DD- и DT-нейтронов, а также топливное отношение.

В данной работе представлены разработанные методы определения необходимых параметров DD- и DT-полей для ряда детекторов нейтронного излучения: на основе органического сцинтилляционного кристалла паратерфенила ( $C_{18}H_{14}$ ) и урановых камер деления ( $U_{235}$  и  $U_{238}$ ). Камеры деления будут использоваться в качестве диагностик полного нейтронного выхода из плазмы токамака-реактора ИТЭР; органические сцинтилляторы, к ряду которых относится паратерфенил, также широко применяются в составе комплексов нейтронной спектрометрии ИТЭР. Экспериментальная кампания проводилась на стенде нейтронной диагностики ГНЦ РФ ТРИНИТИ. Источником DD-нейтронов являлся нейтронный генератор НГ-14, а источником DT-нейтронов — нейтронный генератор ИНГ07Т. Максимальный выход нейтронов в эксперименте составлял  $\sim 2 \cdot 10^8$  н/сек и  $\sim 10^9$  н/сек для DD- и DT-генераторов соответственно. Измерения проводились в пространственной точке между мишенями нейтронных генераторов, в которой значение плотности потока DT-нейтронов составляло не более 5% от плотности потока DD-нейтронов. Схема эксперимента с урановыми камерами деления ИКД КНТ30-8 и ИКД КНТ30-5 приведена на рис. 1.

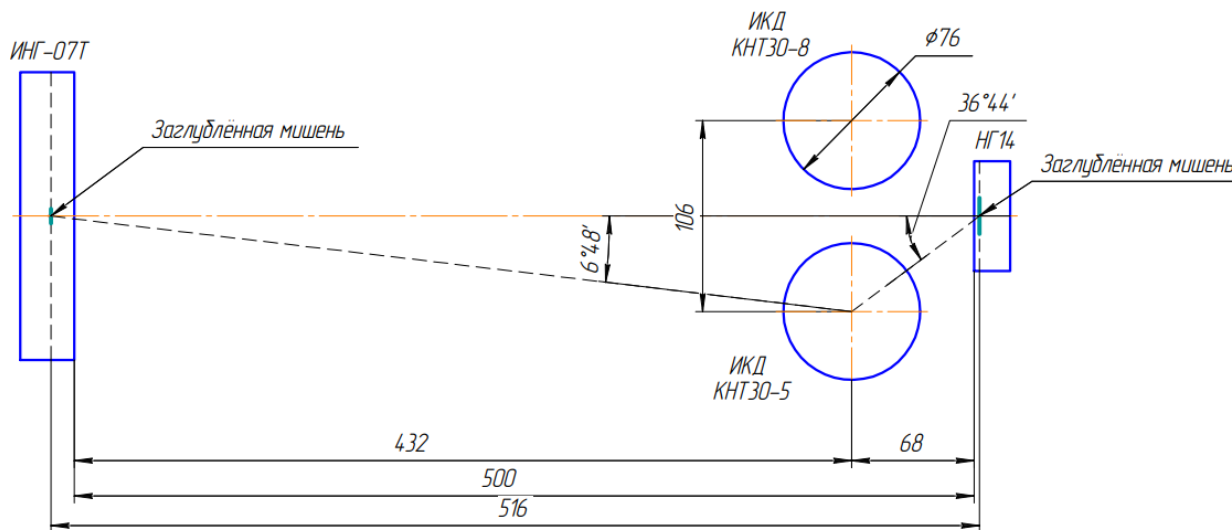


Рис. 1. Схема эксперимента с камерами деления. Характерные размеры приведены в миллиметрах

### Литература

1. *Obudovskii S. Yu.* [et al.]. Metrological assurance of thermonuclear neutron flux density measurements // *Meas. Tech.* 2016. V. 59(3). P. 288–292.

## Измерение временного профиля мощности мультитераваттного излучения Z-пинча волоконно-вольфрамовых сборок на установке «Ангара-5-1»

Е. П. Ахмеров<sup>1,2</sup>, А. Н. Грицук<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ»

На установке «Ангара-5-1» было обнаружено, что при использовании имплозии вложенной волоконно-проволочной сборки в качестве нагрузки для создания Z-пинча мощность мягкого рентгеновского излучения (МРИ) (в диапазоне энергии квантов  $>100$  эВ) возрастает по сравнению со случаем использования одиночной вольфрамовой сборки той же массы и при том же уровне разрядного тока [1]. Существенное увеличение мощности происходит в диапазоне длин волн  $\sim 20\text{--}40$  Å; кривая 1 — спектр вложенной сборки, кривая 2 — одиночной на рис. 1.

Временной профиль импульса МРИ регистрируется набором четырех вакуумных рентгеновских диодов (ВРД) [2]. Чтобы определить повышение пиковой мощности во всем диапазоне излучения Z-пинча с учетом диапазона  $\sim 20\text{--}40$  Å, в одном из четырех диодов была уменьшена толщина лавсанового фильтра с 2,3 мкм до 0,6 мкм. Как видно из рисунка, чувствительность датчика с более тонким фильтром (кривая 3, рис. 1) многократно превышает чувствительность датчика с фильтром толщиной 2,3 мкм (кривая 4, рис. 1). Поэтому необходимо дополнительное ослабление МРИ-пинча для работы ВРД в линейном режиме.

Излучение Z-пинча было ослаблено с помощью «серого» фильтра, коэффициент пропускания которого не зависит от длины волны. Для этого была рассчитана и изготовлена мелкоячеистая металлическая сетка с пропусканием 0,4. Измерение временного профиля импульса МРИ при имплозии вложенных волоконно-вольфрамовых сборок ВРД-детектором с фильтром 0,6 мкм показало трехкратное увеличение мощности по сравнению с одиночной сборкой, что существенно больше увеличения сигнала ВРД с фильтром 2,3 мкм [1] и отражает существенный вклад в импульс МРИ пинча из интервала  $\sim 20\text{--}40$  Å.

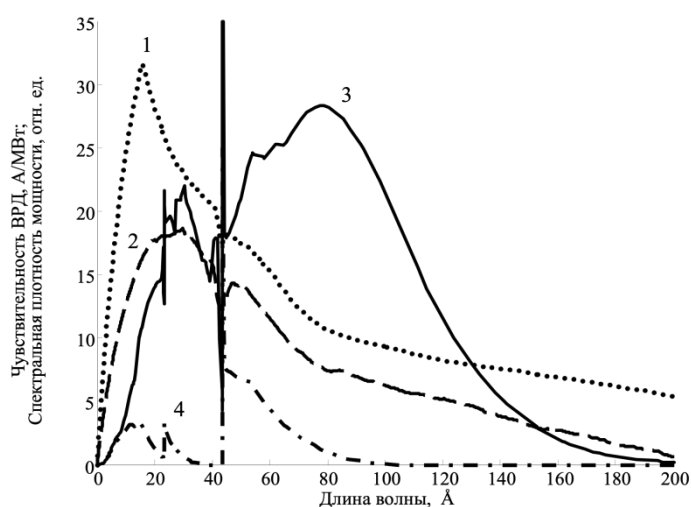


Рис. 1. Спектры излучения пинча от имплозии вложенной (1) и одиночной (2) сборки; чувствительность ВРД с фильтром из лавсана толщиной 0,6 мкм — (3), с фильтром толщиной 2,3 мкм (4)

### Литература

1. Mitrofanov K. N., Aleksandrov V. V. [et al.]. Progress in researching the implosion of nested arrays of mixed composition and the generation of soft X-ray power pulse // Plasma Phys. Control. Fusion. 2022. V. 64: 045007.
2. Gritsuk A. N. [et al.]. Radiation anisotropy at the implosion of multiwire arrays // IEEE Transactions on Plasma Science. 2013. V. 41(11). P. 3184–3189.
3. Грабовский Е. В., Олейник Г. М., Порофеев И. Ю. Измерение распределения интеграла по времени энергетической яркости Z-пинча в мягком рентгеновском излучении на установке «Ангара-5-1» // Приборы и техника эксперимента. 2006. № 2. С. 116–120.

# Секция фотоники и двумерных материалов

Председатель: Д. Г. Баранов (к. ф.-м. н.), С. М. Новиков (к. ф.-м. н.)

Зам. председателя: А. Д. Большаков (к. ф.-м. н.)

Секретарь: М. К. Татмышевский, К. В. Воронин

Дата: 04.04.2023 и 05.04.2023

Время: 10:00

УДК 543.424.2

## Исследование оптических свойств слоистого соединения $\text{EuS}_2$ , синтезированного при высоком давлении, с помощью комбинационного рассеяния света с разрешением по поляризации

*Е. А. Екимов<sup>2</sup>, С. Н. Николаев<sup>1</sup>, И. И. Усманов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>2</sup>Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН

Слоистые полупроводники дихалькогениды переходных металлов (ДПМ), активно изучаемые в последние годы, представляют большой интерес как для фундаментальной, так и прикладной науки благодаря своим механическим, оптическим и электрическим свойствам. Возможность управлять шириной и характером запрещенной зоны, подбирая нужную толщину образца, делает эти соединения привлекательными для нового поколения оптоэлектронных устройств [1–3]. В связи с их уникальными свойствами ведется поиск других узкозонных слоистых полупроводников

Дисульфид европия — это ДПМ, о котором известно сравнительно мало. Первая статья про  $\text{EuS}_2$  была написана почти полвека назад [4]. А кроме структурных свойств, об этом соединении ничего не известно.

В данной работе обсуждаются структурные и оптические свойства новой слоистой фазы дисульфида европия. Основной упор был сделан на определении кристаллографической ориентации тонких чешуек с помощью спектров комбинационного рассеяния света (КРС) с разрешением по поляризации.

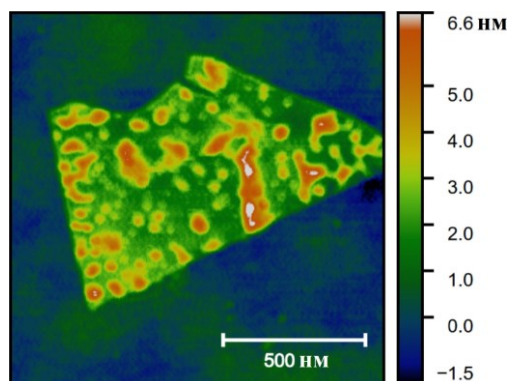


Рис. 1. АСМ-изображение чешуйки  $\text{EuS}_2$  на подложке  $\text{Si/SiO}_2$ . Толщина чешуйки примерно равна 1,4–2 нм

Материал синтезировался при температурах 1250°C и при давлениях 8–9 ГПа. Измерения спектров КРС проводились в геометрии обратного рассеяния как при комнатной температуре, так и при температуре жидкого азота. При температуре 77 К ширины линий КРС резко сужались, что позволило разрешать близкие пики. В качестве источника стационарного возбуждения использовался непрерывный лазер с длиной волны 532 нм. Спектральное разрешение спектрометра было не хуже  $3 \text{ см}^{-1}$ . Различная поляризация лазерного излучения устанавливалась с помощью призм Глана–Тейлора. Чешуйки  $\text{EuS}_2$  были получены с помощью клейкой ленты из объемного материала и затем переносились на подложку  $\text{Si/SiO}_2$ .

Толщина полученных образцов определялась с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ). Пример пленки с толщиной 1–2 нм показан на рис. 1. Основное внимание уделялось пикам на  $400$  и  $411$   $\text{см}^{-1}$  (см. рис. 2), отнесенным к  $B_g$  и  $A_g$  фоновым модам соответственно. В экспериментах анализировались изменения интенсивности этих линий в зависимости от ориентации плоскости линейной поляризации возбуждающего лазерного излучения.

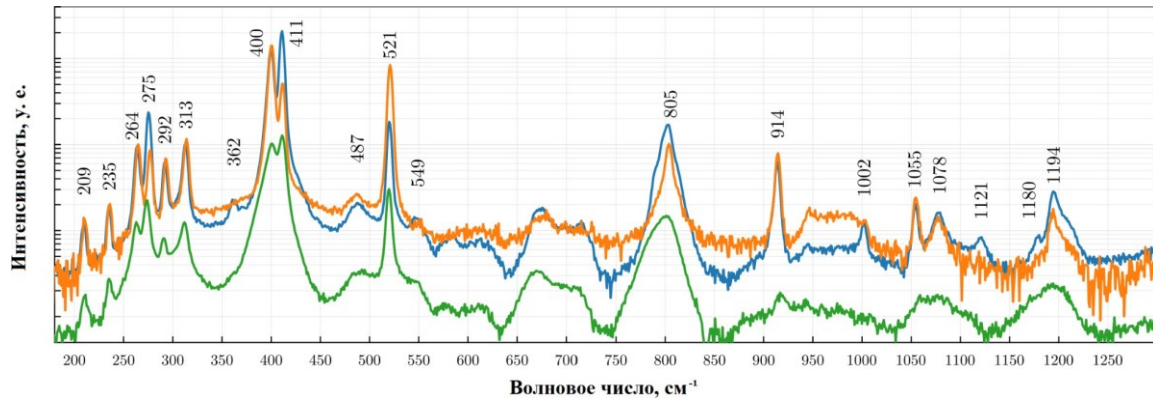


Рис. 2. Спектры комбинационного рассеяния света для двух чешуек  $\text{EuS}_2$ , снятые в геометрии  $X(\alpha\alpha)\underline{X}$  (параллельные поляризаторы) (синяя и оранжевая кривые) при  $80$  К. Спектры отличаются из-за различной кристаллографической ориентации относительно поляризации лазера. Зеленая кривая — спектр комбинационного рассеяния света, снятый при комнатной температуре

В результате исследования были построены угловые распределения интенсивности исследуемых пиков (рис. 3). Такие зависимости характерны для рассеяния на фонах, преобразующихся в соответствии с различными представлениями точечной группы  $2/m$ . Обнаружено, что для фона  $B_g$  интенсивность линии в параллельных поляризаторах под углом  $0^\circ$  намного меньше, чем при  $90^\circ$ . На основе расчетной модели показано, что с помощью этой особенности можно определить направление главной оси кристалла  $\text{EuS}_2$  (см. рис. 3z).

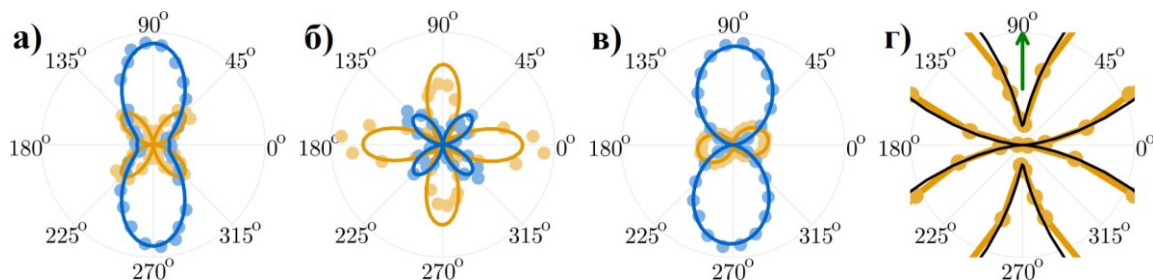


Рис. 3. Угловое распределение интенсивности комбинационного рассеяния в геометрии: *a* —  $X(\alpha\alpha)\underline{X}$  (параллельные поляризаторы); *б* —  $X(\alpha\alpha+\pi/2)\underline{X}$  (скрещенные поляризаторы) в зависимости от угла поляризации падающего луча; *в* —  $X(Z\alpha)\underline{X}$  в зависимости от угла анализатора. Синие линии и точки обозначают  $411$   $\text{см}^{-1}$  ( $A_g$ ), оранжевые —  $400$   $\text{см}^{-1}$  ( $B_g$ ); *г* — масштабированная область угловой диаграммы  $B_g$  (оранжевая) и вычисленная кривая (черная) в предположении взаимной дезориентации кристаллографических осей и вектора электрического поля падающего света. Направление главной оси отмечено зеленой стрелкой

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 23-22-00444.

### Литература

1. *Splendiani A.* [et al.]. Emerging Photoluminescence in Monolayer  $\text{MoS}_2$ // Nano Lett. 2010. V. 10. P. 1271–1275.
2. *Radisavljevic B.* [et al.]. Single-layer  $\text{MoS}_2$  transistors// Nat. Nanotechnol. 2011. V.6. P. 147–150.
3. *Lopez-Sanchez O.* [et al.]. Ultrasensitive photodetectors based on monolayer  $\text{MoS}_2$ // Nat. Nanotechnol. 2013. V. 8. P. 497–501.
4. *Eliseev A. A.* [et al.]. Inorganic materials. 1974. V. 10. P. 1832–1836.

## Определение оптических констант ван-дер-ваальсовых материалов методами поляризационной микроспектроскопии

*А. С. Славич, Г. А. Ермолаев, М. С. Миронов, А. Н. Токсумаков*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Оптическая анизотропия играет важную роль в нанопотонике нового поколения. С этим параметром связано множество физических эффектов, которые могут быть использованы в нанопотонных устройствах [1]. Недавно было продемонстрировано, что ван-дер-ваальсовы кристаллы, обладающие слабой связью между плоскостями ковалентно связанных атомов, характеризуются гигантской оптической анизотропией [2, 3]. При этом известно, что ряд ван-дер-ваальсовых кристаллов характеризуется высокими показателями преломления и низкими оптическими потерями в видимом и инфракрасном диапазонах длин волн, что открывает дополнительные возможности для их практического применения в нанопотонике [4]. Изучение оптических свойств таких кристаллов затруднено тем, что кристаллы высокого качества ограничены в латеральных размерах величинами порядка 100 мкм. Вследствие этого определение их оптических констант методами классической эллипсометрии становится трудной задачей.

В докладе представлена методика по определению оптических свойств ван-дер-ваальсовых кристаллов в плоскости, параллельной слоям сильно связанных атомов, с помощью микроспектроскопии пропускания. В рамках исследования создана установка на основе биологического микроскопа, работающего в режиме пропускания, в соответствии с ранее опубликованной работой [5]. Данный прибор позволяет получать спектры пропускания в видимом диапазоне из области с латеральным размером <5 мкм. По результатам исследования отработана методика получения спектров пропускания, их анализа и определения оптических констант. Разработанная методика позволяет определять оптические константы механически расслоенных кристаллов с латеральными размерами, не превышающими 5 мкм. Это существенно расширяет спектр возможностей в изучении оптических свойств ван-дер-ваальсовых материалов в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах длин волн.

### Литература

1. *Jahani S., Jacob Z.* All-dielectric metamaterials // *Nat. Nanotechnol.* 2016. V. 11. P. 23–26.
2. *Segura A.* [et al.]. Natural optical anisotropy of h-BN: highest giant birefringence in a bulk crystal through the mid-infrared to ultraviolet range // *Phys. Rev. Mater.* 2018. V. 2: 024001.
3. *Ermolaev G.* [et al.]. Giant optical anisotropy in transition metal dichalcogenides for next-generation photonics // *Nat. Commun.* 2021. V. 12: 854.
4. *Munkhbat B.* [et al.]. Nanostructured transition metal dichalcogenide multilayers for advanced nanophotonics // *Laser Photonics Rev.* 2022. V. 17: 2200057.
5. *Frisenda R.* [et al.]. Micro-reflectance and transmittance spectroscopy: a versatile and powerful tool to characterize 2D materials // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2017. V. 50(7): 074002.

## Оптомеханические модуляторы терагерцевого излучения на основе пленок одностенных углеродных нанотрубок

*В. В. Старченко<sup>1</sup>, М. И. Пауков<sup>1</sup>, Д. В. Красников<sup>2</sup>, Ю. Г. Гладуш<sup>2</sup>, С. С. Жуков<sup>1</sup>, Б. П. Горшунов<sup>1</sup>, Г. А. Командин<sup>3</sup>, А. Г. Насибулин<sup>2</sup>, А. В. Арсенин<sup>1</sup>, В. С. Волков<sup>1</sup>, М. Г. Бурданова<sup>1,4</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Сколковский институт науки и технологий

<sup>3</sup>Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН

<sup>4</sup>Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН

В наши дни области применения терагерцевого излучения простираются от медицины, включая диагностику опухолей и контроль качества лекарств, до систем безопасности и высокоскоростной передачи информации. Эти применения обусловлены неинвазивностью, разрешением, малым затуханием на расстояниях и пропускной способностью данного излучения. Среди названных направлений задача

быстрой передачи большого объема данных является наиболее активно развивающейся. Так, в планах ведущих IT-держав США и Японии стоит цель разработать 6G-технологии, основанные на терагерцевой передаче сигнала. Помимо генерации на определенной длине волны и детектировании излучения, сигнал должен модулироваться. Модуляция определяется проводимостью среды, через которую проходит терагерцевое излучение. Это позволяет контролировать параметры модуляции оптически, термически или оптически.

Объемные полупроводниковые материалы, такие как GaAs, Ge and Si, имеют либо высокую скорость модуляции, либо высокую глубину модуляции. При этом низкоразмерные материалы, например графен и углеродные нанотрубки (УНТ) [1], показывают высокие значения обоих параметров при оптической и электрической модуляции.

Недавно также была продемонстрирована перспектива использования углеродных нанотрубок в качестве растягиваемого материала для гибкой электроники [2]. При этом ранее одновременное использование двух степеней свободы для контроля ТГц излучения — оптической и механической — ранее не использовалось.

В данной работе изучались параметры модуляции терагерцевого сигнала при прохождении через тонкие пленки одностенных УНТ, нанесенных на растягиваемую подложку, методом спектроскопии оптической накачки терагерцевого зондирования. С этой целью было проведено исследование поведения фотопроводимости в зависимости от относительного удлинения пленки и ее толщины, а также представлена интерпретация изменения параметров фотопроводимости в зависимости от растяжения. Полученные модуляторы также были охарактеризованы с практической точки зрения: были отмечены широкий диапазон глубины модуляции (от 5 до 100%) и малое время релаксации фотовозбужденных носителей зарядов (порядка 10 пс). Данное исследование позволяет создавать устройства перестраиваемой оптоэлектроники перспективные в терагерцевых системах передачи информации.

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФИ № 21-79-10097.

## Литература

1. *Gilshetein P.* [et al.] Mechanically tunable single-walled carbon nanotube films as a universal material for transparent and stretchable electronics // *ACS Applied Materials and Interfaces*. 2019. V. 11(30). P. 27327–27334.
2. *Burdanova M. G.* [et al.] Ultrafast, high modulation depth terahertz modulators based on carbon nanotube thin films // *Carbon*. 2021. V. 173. P. 245–252.

УДК 535-45

## Топологический эффект Фарадея для оптических вихрей в магнитной пленке

*А. Ю. Федоров<sup>1,2</sup>, М. А. Яворский<sup>3</sup>, М. А. Кожяев<sup>2</sup>, Д. В. Викулин<sup>3</sup>, Е. В. Баршак<sup>3</sup>, В. Н. Бержанский<sup>3</sup>,  
П. О. Капралов<sup>2</sup>, В. И. Белотелов<sup>1,3,4</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Российский квантовый центр

<sup>3</sup>Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского

<sup>4</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Оптические вихревые пучки (ОВП) благодаря своей фазовой структуре широко используются в различных областях физики [1]. Такие пучки могут нести дополнительный орбитальный угловой момент (ОУМ) [2]  $l\hbar$  на квант, где  $l = \pm 1, \pm 2, \dots$  — топологический заряд, по сравнению с плоскими волнами, которые несут только спиновый угловой момент (СУМ). Недавние экспериментальные исследования показали, что взаимодействие терагерцевых ОВП с намагниченной средой приводит к дихроизму, отличному для волны только с СУМ [3, 4]. Это открытие доказывает, что включение ОВП в стандартную конфигурацию Фарадея может вызывать принципиально новые магнитооптические явления.

Таким образом, в данной работе мы делаем первые шаги к изучению влияния наличия орбитального углового момента в пучке на основные эффекты магнитооптики. А именно, мы исследуем зависимость фарадеевского вращения сильно сфокусированного лаггерр–гауссового пучка от положения фокусировки вдоль магнитной пленки (рис. 1). В эксперименте генерируются оптические вихри с топологическими зарядами  $l = 0, \pm 1, \pm 2$ , которые фокусируются на феррит-гранатовую пленку толщиной 2 мкм. Для каждого положения образца относительно перетяжки было измерено фарадеевское вращение (рис. 2).

Шаг смещения образца составлял 1,25 мкм. Также были получены результаты для разных ширины пучка в перетяжке (рис. 2) при фиксированном топологическом заряде ( $l = 0$ ).

Из полученных результатов следует, что существует немонотонная зависимость поворота плоскости поляризации линейно поляризованного оптического вихря, проходящего через феррит-гранатовую пленку в перпендикулярном магнитном поле (топологический эффект Фарадея), как от топологических заряда, так и от положения образца относительно перетяжки ( $z=0$ ). В перетяжке исследуемый эффект имеет характерный минимум: в случае  $w = 1,5$  мкм для  $l = 0$  эта величина составляет 0,15%, для  $l = \pm 1$  — 0,29%, для  $l = \pm 2$  — 0,44%, и хорошо согласуется с экспериментальной кривой аппроксимации.

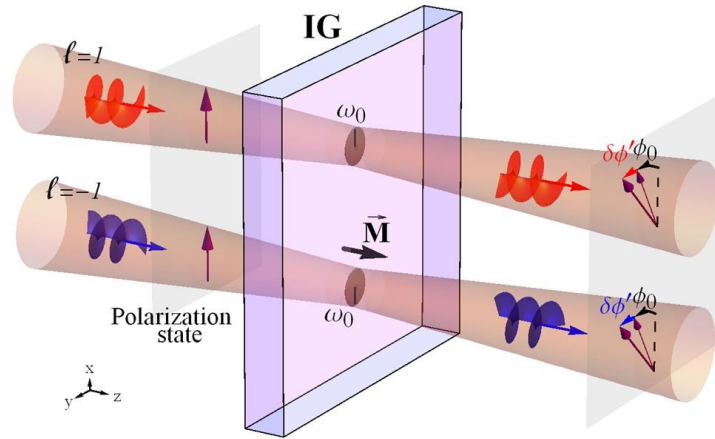


Рис. 1. Схема прохождения сфокусированного ОВП через магнитную пленку с последующим поворотом плоскости поляризации

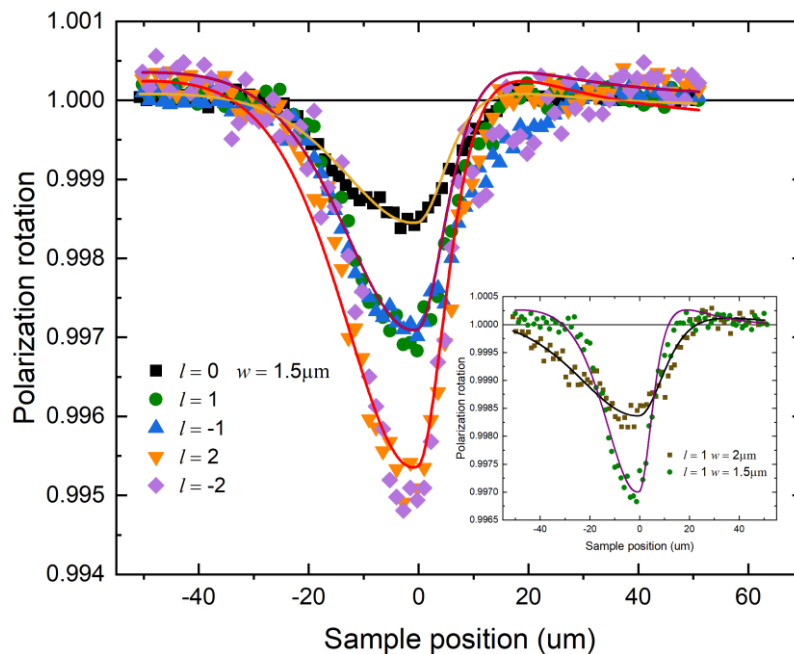


Рис. 2. Нормированный угол фарадея для ширины пучка  $w = 1,5$  для топологических зарядов  $l = 0, \pm 1, \pm 2$  от положения образца относительно перетяжки. Вставка сравнивает топологический эффект Фарадея для  $l = 1$  с различной перетяжкой пучка:  $w = 1,5$  и 2 мкм

### Литература

1. Shen Y. [et al.]. Optical vortices 30 years on: OAM manipulation from topological charge to multiple singularities // Light Sci. Appl. 2019. V. 8: 90.
2. Bekshaev A., Bliokh K. Y., Soskin M. Internal flows and energy circulation in light beams // J. Opt. 2011. V. 13: 053001.
3. Sirenko A. A. [et al.]. Terahertz vortex beam as a spectroscopic probe of magnetic excitations // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122: 237401.
4. Liberman V. S., Zel'dovich B. Y. Spin-orbit interaction of a photon in an inhomogeneous medium // Phys. Rev. A. 1992. V. 46. P. 5199–5207.

## Эффект Гуса–Хенхен в сингулярной точке отражения

М. Е. Хаверонин, А. А. Вишневый

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Отражение луча от поверхности может приводить к разным отклонениям от законов геометрической оптики. К эффектам, приводящим к таким отклонениям, можно отнести спиновый эффект Холла света, когда при отражении линейно поляризованный луч распадается на два с разными поляризациями, Вигнеровскую задержку времени, эффект, обобщающий понятие групповой скорости, и эффект Гуса–Хенхена, при котором при отражении от поверхности луч смещается относительно точки падения луча на поверхность. Эти эффекты объединяет то, что они зависят от производной коэффициента отражения. В нашей работе мы рассматриваем эффект Гуса–Хенхена и обобщаем результаты на перечисленные эффекты. В большинстве случаев смещение Гуса–Хенхена оказывается очень малым, однако в последнее время были открыты способы его усилить и использовать в сенсорах и оптических дифференциаторах [1]. Объясняется эффект тем, что локализованный в пространстве луч представляет собой набор плоских волн, каждая из которых при отражении набирает свою фазу. Возникающее вследствие этого смещение отраженного луча определяется тем, насколько быстро фаза отражения изменяется при изменении угла падения [3]. В случае, если амплитуда отражения близка к нулю, производная меняется очень быстро (а в сингулярной точке или, иначе говоря, нуле отражения, скачком), что формально дает практически «бесконечный» поперечный сдвиг [2]. В данной работе исследуется отражение светового пучка в сингулярной точке. Падающий свет рассматривается как гауссов пучок, а коэффициент отражения считается в окрестности нуля как  $r = C(|k_{\parallel}| - |k_{cr}|)$ , где  $k_{\parallel}$  — проекция волнового вектора падающей волны на отражающую поверхность, а  $k_{cr}$  — компонента волнового вектора в плоскости отражающей поверхности, соответствующая нулевому отражению.

Расчеты показывают, что отраженный луч представляет собой суперпозицию мод Лагерра–Гаусса с орбитальными моментами  $l = \pm 1$  (рис. 1). При достаточно больших значениях производной коэффициента отражения данная система может быть хорошим преобразователем света без орбитального момента в свет с орбитальным. Для исследования такого условия были промоделированы разные многослойные структуры с помощью трансфер-матричного метода.

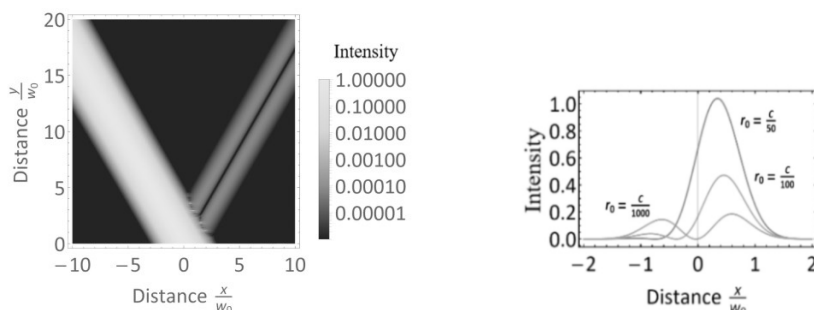


Рис. 1. Распределение интенсивности падающего и отраженного лучей в плоскости падения

Рис. 2. Профиль интенсивности отраженного света для разных значений  $r_0$  в формуле (1)

Расстояние между пиками интенсивности в поперечном сечении определяется радиусом перетяжки  $w_0$ , определяемым гауссовым распределением. Распределение электрического поля в отраженном луче представляет собой производную распределения поля в падающем пучке в направлении перпендикулярном направлению распространения, что позволяет использовать такую конфигурацию в оптических вычислительных схемах.

Чтобы сравнить результат с формулой для величины сдвига Гуса–Хенхен, мы рассмотрели коэффициент отражения в виде

$$r = C(|k_{\parallel}| - |k_{inc}|) + r_0, \quad (1)$$

где  $r_0$  — значение коэффициента отражения при  $k_{\parallel} = k_{inc}$ , а  $k_{inc}$  — компонента волнового вектора падающего луча в плоскости отражающей поверхности. Чем меньше  $r_0$ , тем больше сдвиг, однако, когда он достигает величины сопоставимой с радиусом перетяжки, возникает и растет второй максимум, а при  $r_0 \rightarrow 0$  распределение интенсивности становится симметричным (рис. 2).

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 22-79-10312).



## Литература

1. *Jiang L., Zeng S., Xu Z.* [et. al.]. Multifunctional Hyperbolic Nanogroove Metasurface for Submolecular Detection // *Small*. 2007. V. 13(30): 1700600.
2. *Yin X., Hesselink L.* Goos-Hänchen shift surface plasmon resonance sensor // *Appl. Phys. Lett.* 2006. V. 89: 261108.
3. *Artmann K.* Berechnung der Seitenversetzung des totalreflektierten Strahles // *Ann. Physik*. 1948. V. 437. P. 87–102.

УДК 535-46

### Определение плазменной частоты платины

*А. П. Целин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Платина имеет несколько привлекательных свойств для различных применений оптики и фотоники, таких как слабое взаимодействие с кислородом и большой коэффициент отражения в глубоком УФ. Поэтому изучение свойств этого материала является важной задачей для ученых. Несмотря на длительную историю изучения оптических свойств платины (первые статьи датируются с 1960-х гг.), в литературе представлено мало информации об этом материале. Основная масса работ направлена на изучение отражения в глубоком УФ. Также недавние статьи [1] показывают неточность имеющихся результатов. Одной из таких неточностей является значение плазменной частоты платины, которая является важной характеристикой материала. Также есть теоретические расчеты этой характеристики, которые следует подтвердить или опровергнуть. Поэтому в этой работе изучаются оптические свойства платины в широком диапазоне длин волн для дальнейшего определения плазменной частоты.

В данной работе измеряется диэлектрический отклик платины с помощью эллипсометрии, определяется проводимость носителей заряда. Чтобы получить плазмонную частоту применяется модель Друде–Лоренца, которая хорошо описывает диэлектрическую функцию металлов в широком диапазоне длин волн. Также сравнивается полученная плазменная частота с теоретическими расчетами [2].

## Литература

1. *Glantschnig K., Ambrosch-Draxl C.* Relativistic effects on the linear optical properties of Au, Pt, Pb and W // *New J. Phys.* 2010. V. 12(10): 103048.
2. *Pogodaeva M. K., Levchenko S. V., Drachev V. P.* Spin-dependent plasma frequency from all-electron ab initio calculations including spin-orbit coupling // *Phys. Rev. B*. 2023. V. 107(4): 045113.

УДК 533.922

### Высокодобротные резонансы в сферических наночастицах с радиальной анизотропией

*А. Эгбали, А. А. Вишневый*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Возможность получения резонансов с высокой добротностью является одной из актуальных тем исследований в области нанофотоники. Резонаторы с высокой добротностью необходимы для достижения высокой степени усиления/локализации поля и уменьшения оптических потерь, обеспечивают эффективную платформу для сильного взаимодействия излучения и вещества для применений в нелинейной оптике, лазерах и сенсорах [1]. В данной работе изучалось влияние радиальной анизотропии на оптические свойства сферических наночастиц, включая однородные сферы и наночастицы типа ядро-оболочка (рис. 1).

Исследование влияния анизотропии на оптические свойства сферических наночастиц мотивировано недавним прогрессом в области их изготовления методом лазерной абляции [2]. В частности, в [2] было показано, что оптические свойства материала в наночастицах не отличаются от оптических свойств в тонких пленках. В результате расчетов было получено, что для изотропных материалов добротность мультипольных резонансов увеличивается с увеличением показателя преломления. Однако добротность в радиально-анизотропных наносферах может увеличиваться при уменьшении радиальной составляющей, особенно при приближении радиальной составляющей к 1, что можно объяснить, используя понятие

эффективного показателя преломления для рассеяния, введенное в нашей предыдущей работе [3]. Кроме того, добротность может быть увеличена еще в 30 раз в наночастицах ядро–оболочка за счет резонанса Фано, показанного на (рис. 2). Полученные результаты открывают возможность создания нанолазеров на основе наночастиц без использования металлов, а также указывают на новые возможности анизотропных материалов для широкого спектра применений.



Рис. 1. Сфера с радиальной анизотропией (а); структура ядро–оболочка (б) с изотропным ядром с радиусом  $r_1$  и показателем преломления  $n_i$  и с радиальной анизотропной оболочкой  $r_2$  и радиальным и тангенциальным показателями преломления  $n_r$  и  $n_t$  соответственно

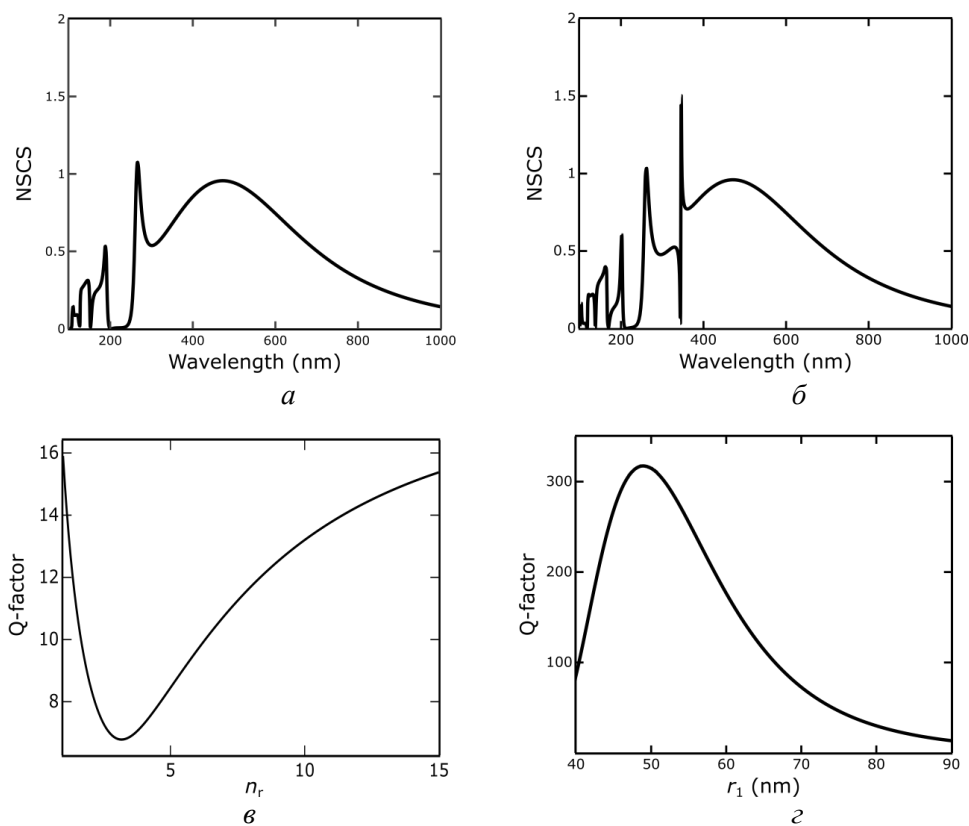


Рис. 2. Нормированное сечение рассеяния электрической дипольной моды для: а — сферы с радиальной анизотропией  $r=100$  нм и  $n_t=4$ ; б — структуры ядро–оболочка с изотропным ядром радиуса  $r_1=50$  нм, показателем преломления  $n_i=4$ , оболочкой с внешним радиусом  $r_2=100$  нм и тангенциальной и радиальной компонентами показателя преломления  $n_t=4$  и  $n_r=1$  соответственно; в — добротность основного дипольного резонанса как функция радиальной компоненты показателя преломления для сферы с радиальной анизотропией и  $n_t=4$ ; г — зависимость добротности основного дипольного резонанса от радиуса ядра  $r_1$  для структуры ядро–оболочка с внешним радиусом 100 нм

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-79-10312).

### Литература

1. Sun G., Yuan L., Zhang Y., Zhang X., Zhu Y. Q-factor enhancement of Fano resonance in all-dielectric metasurfaces by modulating meta-atom interactions // Sci. Rep. 2017. V. 7(1): 8128.
2. Tselikov G. I. [et al.]. Transition metal dichalcogenide nanospheres for high-refractive-index nanophotonics and biomedical theranostics // PNAS. 2021. V. 119(39): e2208830119.

3. Eghbali A., Vyshnevyy A. A., Arsenin A. V., Volkov V. S. Optical anisotropy and excitons in MoS<sub>2</sub> interfaces for sensitive surface plasmon resonance biosensors // Biosensors. 2022. V. 12: 582.

УДК 546.05

## Синтез литий-проводящей керамики со структурой NASICON методом быстрого спекания

*И. И. Яковлев<sup>1</sup>, Д. С. Зимбовский<sup>2</sup>, С. Суй<sup>2</sup>, А. В. Кирьянова<sup>2</sup>, П. В. Евдокимов<sup>2</sup>, О. О. Капитанова<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Твердотельные аккумуляторы с электрокерамическим электролитом открывают возможности использования металлического лития и, как следствие, повышения удельной энергоёмкости и мощности батареи. Однако для сохранения конкурентоспособности по сравнению с широко распространёнными литий-ионными аккумуляторами толщина керамического электролита должна быть на уровне десятков мкм (сопоставима по порядку величины с коммерческим полимерным сепаратором). Из литературы продемонстрировано на примере таблеток толщиной несколько мм, что при классических длительных отжигах керамики происходит потеря лития, что приводит к деградации ионной проводимости [1]. Поэтому в тонких мембранах потеря лития только усугубится. В связи с вышесказанным актуальным направлением эффективной консолидации керамических порошков является разработка подхода к быстрому электрическому отжигу. Он позволяет существенно сократить время синтеза, уменьшить затраты на энергетический ресурс при масштабировании производства твёрдого электролита, снизить потери ионов лития и делает возможным внесение легколетучих добавок при спекании. Целью работы являлась разработка подхода к спеканию литий-проводящего порошка с использованием электрического отжига для получения твёрдых электролитов.

Для осуществления спекания была сконструирована установка для электрического отжига с использованием нагревателя из графитового волокна в инертном кварцевом реакторе (рис. 1).

Температуру в процессе спекания контролировали с помощью ИК-пирометра с оптическим прицеливанием, калибровку по температуре дополнительно производили по температуре плавления золота.

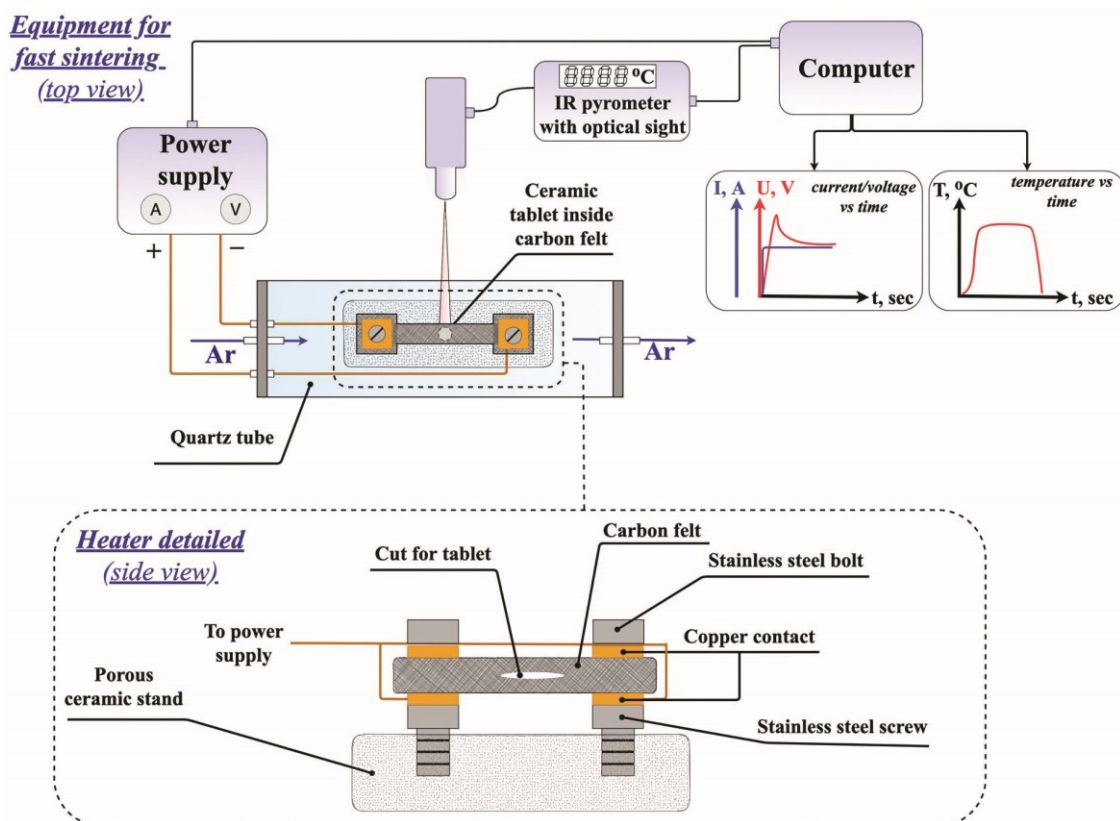


Рис. 1. Общая схема установки для быстрого отжига

Одним из перспективных классов твердых электролитов являются сложные фосфаты со структурой NASICON, а именно,  $\text{Li}_{1+x}\text{Al}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$  (LATP) и  $\text{Li}_{1+x}\text{Al}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$  (LAGP), обладающие высокой ионной проводимостью по литию и устойчивостью к воздуху и влаге [2]. В данной работе проводили спекание спрессованных таблеток электролита LATP ( $x=0,3$ ). Кристаллический порошок был получен методом кристаллизации стекла. Согласно данным рентгенофазового анализа, использование метода быстрого спекания позволяет получить продукт с преимущественным содержанием целевой фазы NASICON. Измерение проводимости по литию полученных материалов проводили с помощью спектроскопии импеданса (рис. 2).

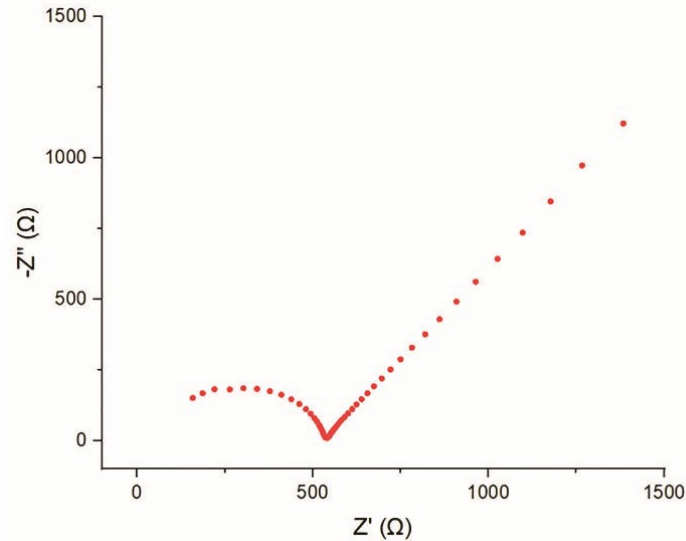


Рис. 2. Вид кривой импеданса в координатах Найквиста для образца, спеченного при 1045°C

Плотность образцов определяли геометрическим методом. Показано, что варьирование температуры (850–1250°C) и времени (60–300 с) обработки образцов позволило получить образцы с высокими значениями относительной плотности (96,1%) и проводимости ( $4,2 \cdot 10^{-3}$  См/см) соответственно. У полученных образцов наблюдалась фиолетовая окраска разной степени интенсивности, что, предположительно, может говорить о частичном восстановлении Ti до степени окисления 3+ и появлении электронной проводимости в керамике. На дальнейшем этапе работы планируется оценка вклада электронной проводимости в керамике и установление ее влияния на электрохимические свойства тестирования ячейки во время электроосаждения лития.

### Литература

1. Lin Y., Luo N., Quattrocchi E. Ultrafast high-temperature sintering (UHS) of  $\text{Li}_{1.3}\text{Al}_{0.3}\text{Ti}_{1.7}(\text{PO}_4)_3$  // *Ceramics International*. 2021. V. 47(15). P. 21982–21987.
2. DeWees R., Wang H. Synthesis and properties of NaSICON-type LATP and LAGP solid electrolytes // *ChemSusChem*. 2019. V. 12(16). P. 3713–3725.

УДК 538.935

## Гальваномагнитные моды в двумерных электронных системах

А. С. Петров

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Во многих приложениях требуется передача модулированного по времени сигнала в заданном направлении без отражений. В электронике для этих целей используют цепи с согласованной нагрузкой между элементами (и когда сигнал доходит до конца цепи, он полностью поглощается приемником), в оптике — оптические изоляторы и циркуляторы на основе гиротропных сред [1]; недавно были предложены схемы, в которых достигается однонаправленное (невзаимное) распространение света благодаря топологическим эффектам [2]. При этом однонаправленное распространение плазмонов, необходимое для создания фотонных интегральных схем, попало во внимание исследователей сравнительно недавно.

В этом свете перспективным видится направление, основанное на невзаимных плазменных модах. Спектр невзаимных плазменных возбуждений, например межкраевых магнитоплазмонов [3] или краевых плазмонов Берри [4, 5], по своей природе не допускает обратного распространения волны, что позволит смягчить требования к чистоте используемых материалов и точности техпроцессов. В то же время применение данных мод на практике зачастую требует использования внешних магнитных полей или легирования полупроводников магнитными допантами, сильно уменьшающими добротность плазменных волн.

Поэтому крайне важно характеризовать невзаимные моды в обычных двумерных системах вроде гетероструктур GaAs/AlGaAs или графена, не требующих приложения магнитного поля. В настоящем докладе будет дан обзор гальваномангнитной моды в двумерных электронных системах, до этого изучавшейся в физике объемных полупроводников [6, 7]. Ключевая особенность данных мод — магнитная (а не электрическая, как в обычном плазмоне) природа возвращающей силы, которая обеспечивается взаимодействием магнитного поля волны с дрейфом носителей заряда или градиентом температуры, соответственно. Благодаря этому данные моды и являются невзаимными: направление их распространения задается соответственно направлением дрейфа или градиентом температуры.

Отметим, что к настоящему моменту предельно хорошо изучены гальванотермомангнитные явления в ДЭС — но исключительно во внешнем магнитном поле. При этом градиент температуры или скорость носителей заряда могли рассматриваться исследователями и как внешний фактор, и как атрибут плазменной волны. Поэтому логичным видится закрыть имеющийся пробел и изучить взаимодействие собственного магнитного поля двумерной плазменной волны с внешним градиентом температуры и/или дрейфом. Именно в этом и состоит новизна проекта.

В докладе будут представлены свежие результаты теоретического исследования характеристик гальваномангнитных мод в двумерных электронных системах (природа возникновения, спектры и ширины линий, пространственный профиль).

Работа выполнена при поддержке стипендии Президента РФ, проект № СП-429.2021.5.

### Литература

1. *Gauthier D. J., Narum P., Boyd R. W.* Simple, compact, high-performance permanent-magnet Faraday isolator // *Opt. Lett.* 1986. V. 11(10). P. 623–625.
2. *Ling L., Joannopoulos J. D., Soljačić M.* Topological photonics // *Nat. Photonics.* 2014. V. 8(11). P. 821–829.
3. *Mikhailov S. A., Volkov V. A.* Inter-edge magnetoplasmons in inhomogeneous two-dimensional electron systems // *J. Phys. Condens. Matter.* 1992. V. 4(31): 6523.
4. *Song J. C. W., Mark S. R.* Chiral plasmons without magnetic field // *PNAS.* 2016. V. 113(17). P. 4658–4663.
5. *Petrov A. S.* Plasmonic excitation for a tunable transmitter without magnetic field immune to backscattering // *Phys. Rev. B.* 2021. V. 104(24): L241407.
6. *Gurevich L. E., Gelmont B. L.* Hydrothermomagnetic waves in a weakly inhomogeneous plasma // *Sov. Physics JETP.* 1964. V. 19(3). P. 604–614.
7. *Kopylov V. N.* Galvanothermomagnetic instability in Bi // *Solid State Communications.* 1980. V. 33. P. 427–428.

УДК 535.361.13

### Ударная волна как решение ОТО, моделируемое в материале

*Д. Г. Баранов, А. А. Белов*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рассмотрено ранее известное в общей теории относительности решение ударной волны

$$ds^2 = du dv + dx^2 + dy^2 - 4\mu \ln(x^2 + y^2) \delta(u) du^2,$$

$$u = z + t,$$

$$v = z - t,$$

для которого построена система материальных уравнений

$$\vec{D} = \hat{\epsilon} \vec{E} + \vec{\alpha} \times \vec{H},$$

$$\vec{B} = \hat{\mu} \vec{H} - \vec{\alpha} \times \vec{E}$$

в соответствии с дуальностью, для заданной метрики  $g_{\mu\nu}$  в пустом криволинейном пространстве можно построить материальные тензоры

$$\varepsilon = \mu = -\frac{\sqrt{-g}}{g_{00}} g^{ij},$$

$$\alpha = \frac{g_{i0}}{g_{00}}$$

в плоском пространстве-времени. Показано, что для такой системы

$$\varepsilon = \frac{1}{1+4\mu\delta(z+t)\ln(x^2+y^2)} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1+4\mu\delta(z+t)\ln(x^2+y^2) \end{pmatrix},$$

$$\alpha = \frac{1}{1+4\mu\delta(z+t)\ln(x^2+y^2)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -4\mu\delta(z+t)\ln(x^2+y^2) \end{pmatrix}.$$

### Литература

1. Leonhardt U., Philbin T. G. Chapter 2 transformation optics and the geometry of light // Prog. Opt. 2009. V. 53. P. 69–152.

УДК 535.015

## Поиск оптимальных режимов генерации сигнала вырожденного четырехволнового смешения в интегральных микрорезонаторах при двойной накачке

*А. К. Воробьев<sup>1,2</sup>, Н. А. Капридов<sup>1,2</sup>, Г. В. Гречко<sup>1,2</sup>, Т. Р. Юнусов<sup>1,2</sup>, Д. А. Чермошеницев<sup>1,5</sup>,  
А. Е. Шитиков<sup>1</sup>, В. Е. Лобанов<sup>1</sup>, А. В. Масалов<sup>1,4</sup>, И. А. Биленко<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup>Российский квантовый центр

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет

<sup>4</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>5</sup>Сколковский институт науки и технологий

Интегральные оптические микрорезонаторы являются перспективной платформой для создания компактных оптических устройств [1]. В работе [2] была показана возможность создания компактного источника сжатого света за счет процесса вырожденного четырехволнового смешения (ВЧВС, генерация сигнала на частоте полусуммы частот накачек) в интегральном микрорезонаторе при использовании двойной накачки. Однако систематическому исследованию оптимальных режимов генерации ВЧВС с двойной накачкой до сих пор не было уделено достаточно внимания. В нашей работе мы экспериментально исследуем процесс ВЧВС в микрорезонаторе с целью повышения мощности сигнала ВЧВС.

Для проведения исследований была собрана установка, позволяющая изменять параметры излучения накачки в широких пределах и осуществлять их точный контроль (рис. 1). В качестве источников излучения используются два непрерывно перестраиваемых лазера, частоты которых измеряются коммерческим интерферометром с точностью 1 МГц. Излучение обоих лазеров усиливается с помощью эрбиевых волоконных усилителей, затем узкополосные фильтры позволяют избавиться от спонтанного излучения усилителей в выходном сигнале. Оптический спектр излучения на выходе из чипа регистрируется с помощью оптического анализатора спектра (ОАС), два фотодетектора с дополнительными оптическими фильтрами позволяют контролировать эффективность возбуждения резонанса.

При заданной мощности накачек генерация спектров выходного излучения существенно зависит от пары частотных отстроек накачек от холодных резонансов микрорезонатора. Для достижения высокого уровня сигнала ВЧВС требуются высокая эффективность возбуждения резонаторных собственных мод. В условиях компенсации сдвига резонансов за счет керровской нелинейности среды использовалось согласованное частотное сканирование накачек  $\zeta_1 = \zeta_2$ , где  $\zeta = (f_{\text{pump},i} - f_{\text{res},i}) / \Delta f_{\text{HWHM}}$  — отстройка частоты  $i$ -й накачки  $f_{\text{pump},i}$  от частоты холодного резонанса  $f_{\text{res},i}$ , нормированная на его спектральную полуширину  $\Delta f_{\text{HWHM}}$ . В процессе сканирования лазеров по частоте проводилось измерение спектров оптическим анализатором спектра. Результат сканирования представляет собой спектры, содержащие множество частотных компонент, порождаемых в процессе нелинейного преобразования волн накачек, где полезная

компонента ВЧВС находится по частоте посередине между частотами накачек и обозначена ромбом на рис. 2. В процессе измерений было установлено, что генерация ВЧВС требует тонкой подстройки частот источников накачки. Так, переход от слабого сигнала ВЧВС (см. спектральную компоненту, выделенную ромбом на рис. 2а) к мощному сигналу (рис. 2б) может произойти при изменении частот накачек на  $\delta f \sim 15$  МГц. Эффективная генерация ВЧВС достигается при точном выполнении условия согласованного сканирования резонансов  $\zeta_1 = \zeta_2$ .

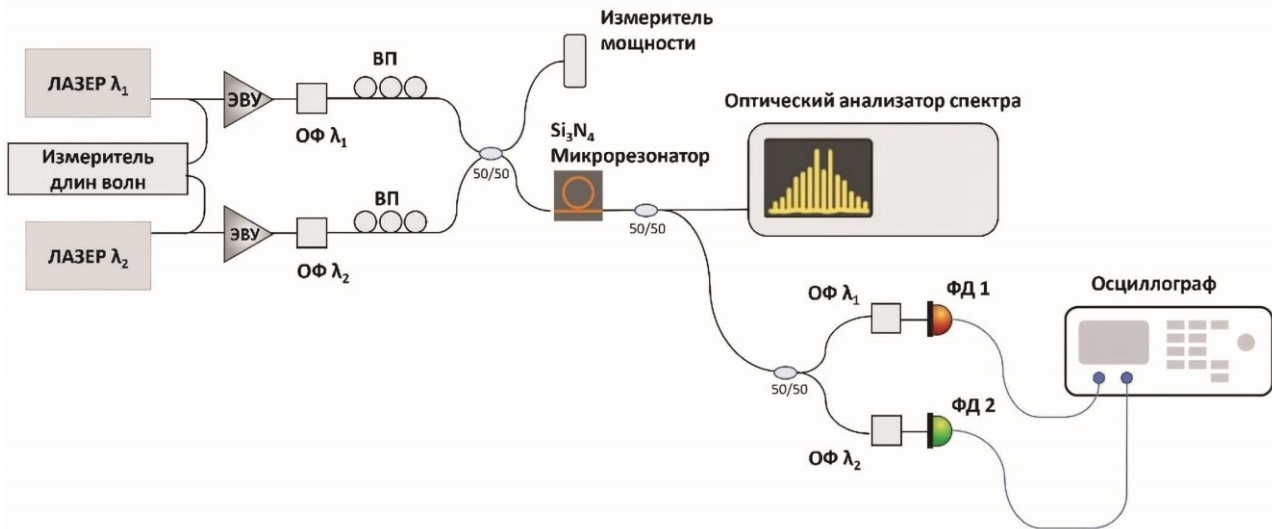


Рис. 1. Экспериментальная установка. Два непрерывно перестраиваемых лазера с длинами волн  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  служат источниками излучения накачки. Длины волн источников измеряются с помощью коммерческого измерителя длин волн (интерферометр Физо). Эрбиевые волоконные усилители (ЭВУ) используются для повышения мощности излучения. Узкополосные оптические фильтры (ОФ) позволяют избавиться от спонтанного излучения ЭВУ. ВП — волоконные вращатели поляризации. Спектры излучения на выходе из микрорезонатора регистрируются с помощью оптического анализатора спектра. Два фотодетектора (ФД) с дополнительными ОФ позволяют контролировать эффективность возбуждения резонансов

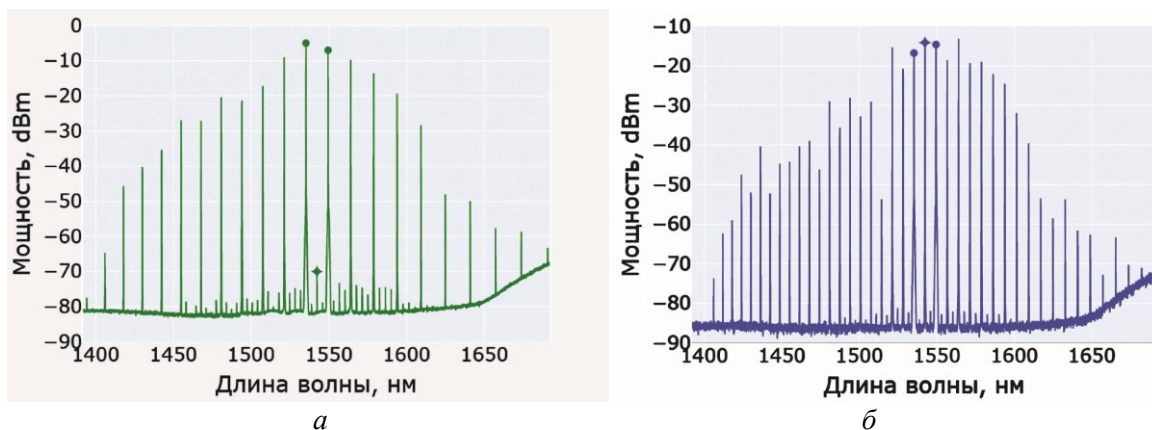


Рис. 2. Экспериментальные результаты. На спектрах (а) и (б) две накачки помечены жирными точками. Сигнал ВЧВС на обоих спектрах помечен ромбом. Спектр (а) показывает режим генерации с маломощным сигналом ВЧВС. Спектр (б) соответствует режиму согласованного частотного сканирования накачек, при котором наблюдается мощный сигнал ВЧВС

Возникновение высокочастотной спектральной компоненты ВЧВС рис. 2б носит пороговый характер и сопровождается резким провалом в мощности накачек на выходе из резонатора, что говорит о сильном энергетическом обеднении накачек за счет происходящего нелинейного процесса.

Таким образом, генерация сигнала ВЧВС носит пороговый характер и зависит от частотных отстройек накачек от холодных резонансов. При добротности микрорезонатора  $Q \sim 6 \cdot 10^5$  ( $\Delta f_{\text{HWHM}} = 150$  МГц) порог генерации ВЧВС составляет 120 мВт. Для достижения эффективной генерации сигнала ВЧВС требуется контроль частот с точностью порядка  $\Delta f_{\text{HWHM}}/10$ . Оптимизация процесса генерации ВЧВС и определение порога генерации необходимы для разработки высокоэффективных и маломощных источников сжатого света [4].

## Литература

1. *Schnabel R.* [et al]. Squeezed states of light and their applications in laser interferometers // *Phys. Rep.* 2017. V. 684(8). P. 1–52.
2. *Vernon Z.* [et al]. Scalable squeezed-light source for continuous-variable quantum sampling // *Phys. Rev. Appl.* 2019. V. 12(6):064024. DOI: 10.1103/PHYSREVAPPLIED.12.064024.
3. *Okawachi Y.* [et al]. Demonstration of chip-based coupled degenerate optical parametric oscillators for realizing a nanophotonic spin-glass // *Nat. Commun.* 2020. V. 11(1): 4119. DOI: 10.1038/s41467-020-17919-6.
4. *Chermoshentsev D. A.* [et al]. Dual-laser self-injection locking to an integrated microresonator // *Opt. Express.* 2020. V. 30(10). V. 17094–17105.

УДК 537.874, 537.876

### Электромагнитные моды в скрученных трехслойных гетероструктурах на основе двуосных кристаллов

*К. В. Воронин<sup>1,2</sup>, В. С. Волков<sup>1</sup>, А. Ю. Никитин<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Международный физический центр Донosti, Испания

Изучение скрученных многослойных структур на основе ван-дер-ваальсовых материалов привело в последние годы к открытию множества замечательных физических явлений [1], а также позволило управлять электронными свойствами материалов, изменяя их в широком диапазоне. Это породило так называемую область твистроники [2]. Аналогичная концепция была разработана для сильно локализованных поляритонов в гетероструктурах, состоящих из двух слоев сильно анизотропных ван-дер-ваальсовых материалов, повернутых друг относительно друга, порождая область твистоптики [3]. В этом случае появление топологического перехода поляритонной дисперсии при заданном угле поворота слоев (фотонный магический угол) приводит к распространению локализованных электромагнитных волн в одном конкретном направлении (режим каналирования), что значительно расширяет возможности управления потоком энергии на наномасштабе [4]. Однако в твистоптике есть фундаментальное ограничение, которое значительно затрудняет такое управление: существует только один фотонный магический угол (и, следовательно, направление каналирования) в двухслойной структуре, и он фиксирован для каждой частоты электромагнитного излучения.

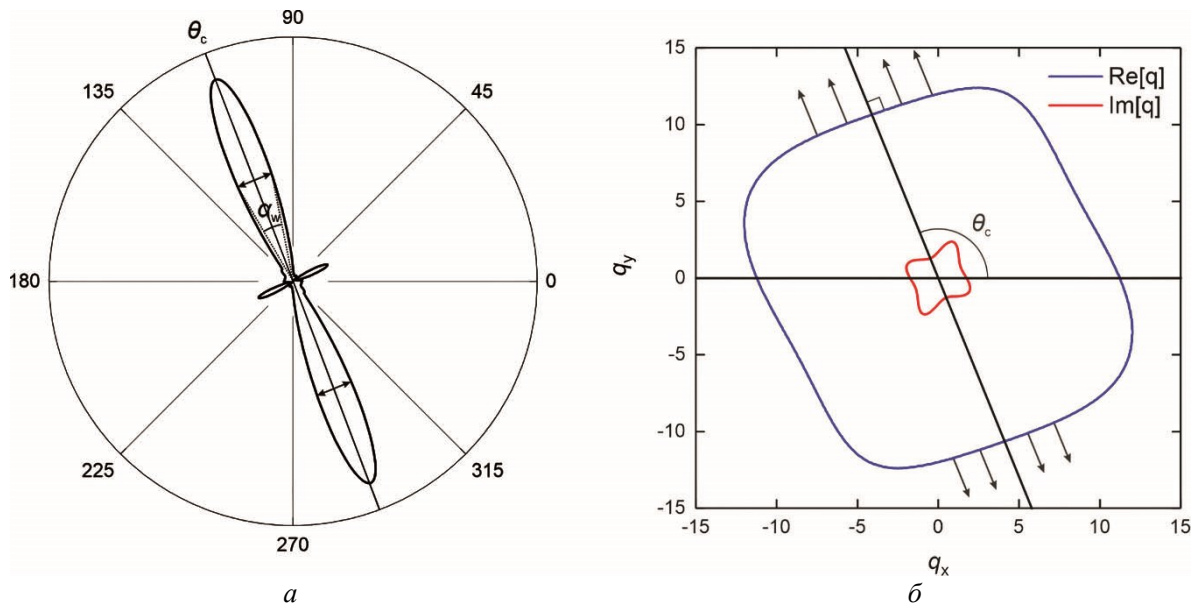


Рис. 1. График направленности распределения поля (а), создаваемого точечным источником над трехслойной структурой, с указанным направлением каналирования  $\theta_c$  и угловой шириной  $\alpha_w$ . Изочастотная кривая (b), соответствующая распределению полей, показанному на рис. а

В данной работе мы преодолеваем это ограничение, демонстрируя существование нескольких спектрально устойчивых фотонных магических углов в скрученных трехслойных гетероструктурах. Мы



показываем, что каналирование света (см. рис. 1) может быть настроено в любом желаемом направлении в плоскости в одном устройстве и, что важно, в широком спектральном диапазоне до  $70 \text{ см}^{-1}$ . Наши результаты закладывают основу для надежной и управляемой твистоптики, имеющей потенциальные приложения в нанофотонике, где решающее значение имеет управление потоками оптической энергии на наномасштабе, например локальное управление температурой или запутывание квантовых излучателей.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-606).

### Литература

1. *Cao Y.* [et al.]. Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices // *Nature*. 2018. V. 556. P. 43–50.
2. *Hunt B.* [et al.]. Massive Dirac fermions and Hofstadter butterfly in a van der Waals heterostructure // *Science*. 2013. V. 340. P. 1427–1430.
3. *Hu G.* [et al.]. Moiré hyperbolic metasurfaces // *Nano Lett.* 2020. V. 20. P. 3217–3224.
4. *Duan J.* [et al.]. Twisted nano-optics: manipulating light at the nanoscale with twisted phonon polaritonic slabs // *Nano Lett.* 2020. V. 20. P. 5323–5329.

УДК 535.93

### Измерение характеристик интегральных оптических микрорезонаторов

*А. П. Горшков<sup>1,2</sup>, А. К. Воробьев<sup>1,2</sup>, Д. А. Чермошенцев<sup>1,2,5</sup>, А. В. Масалов<sup>2,4</sup>, И. А. Биленко<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Российский квантовый центр

<sup>3</sup>Московский государственный университет

<sup>4</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>5</sup>Сколковский институт науки и технологий

Исследования в области интегральных оптических микрорезонаторов являются одним из перспективных направлений современной фотоники. Высокодобротные резонаторы на чипе ( $Q \sim 10^5 \div 10^7$ ), обладающие керровской нелинейностью, получили широкое применение в качестве источников оптических частотных гребенок [1], генераторов квантовых состояний света, параметрических усилителей.

Характер нелинейных процессов преобразования частоты, протекающих в кольцевом микрорезонаторе, определяется его параметрами — добротностью, дисперсией, температурой и др. Данная работа посвящена измерению основных характеристик кольцевых резонаторов, возбуждаемых вытекающим полем прямолинейного волновода: добротности, дисперсии, эффективной константы распространения и их температурных зависимостей.

Измерения проведены на установке рис. 1. Источником излучения служит лазер, перестраиваемый в диапазоне 1510–1630 нм. Частота лазерного излучения в процессе сканирования контролировалась с помощью интерферометра Маха–Цендера [2]. Основная часть излучения лазера через волоконный вращатель поляризации направляется в исследуемый микрорезонатор. Сигнал пропускания микрорезонатора регистрируется фотодетектором ФД1 и осциллографом одновременно с сигналом ФД2 и содержит характерные провалы на резонансных частотах.

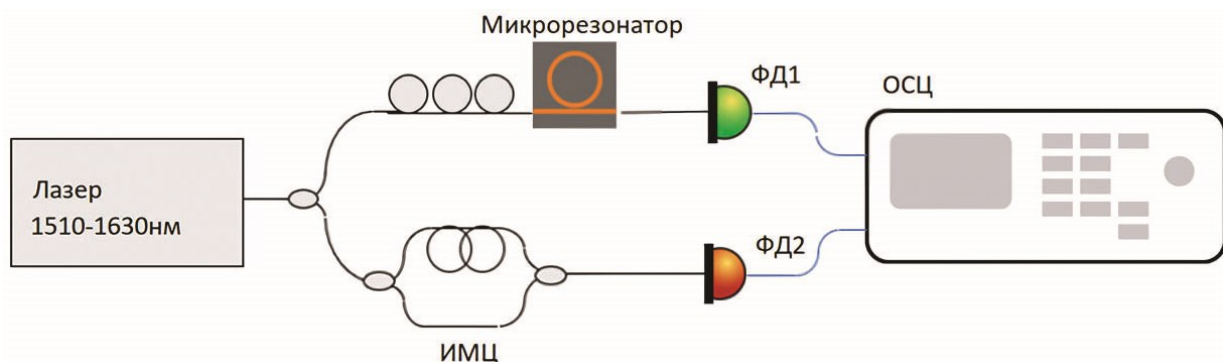


Рис. 1. Схема экспериментальной установки. Источник излучения — перестраиваемый полупроводниковый лазер Topica STL 1550 (1510–1630 нм), ИМЦ — интерферометр Маха–Цендера, ФД1, ФД2 — фотодетекторы, ОСЦ — осциллограф

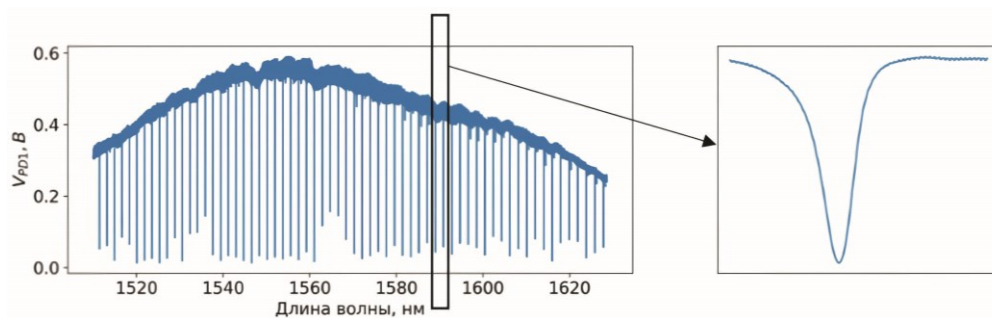


Рис. 2. Спектр пропускания прямолинейного волновода с резонансами кольцевого резонатора

Один из резонансных провалов представлен на рис. 3б. Этот резонанс расщеплен, как и многие другие на рис. 2. Расщепление резонансов имеет место вследствие взаимодействия двух мод, распространяющихся в кольце в противоположных направлениях. Обмен излучением этих мод обусловлен обратным рассеянием, вследствие чего формируются новые совместные моды с симметричным расхождением новых резонансов. Частота между новыми частотами (полусумма расщепленных частот) остается равной частоте исходных невзаимодействующих мод, и поэтому используется в дальнейшем для расчета дисперсии волноводной среды резонатора. Возбуждение новых резонансных мод в кольце происходит под действием излучения прямолинейного волновода, в котором присутствуют волны, распространяющиеся вперед и назад вследствие отражений от торцов.

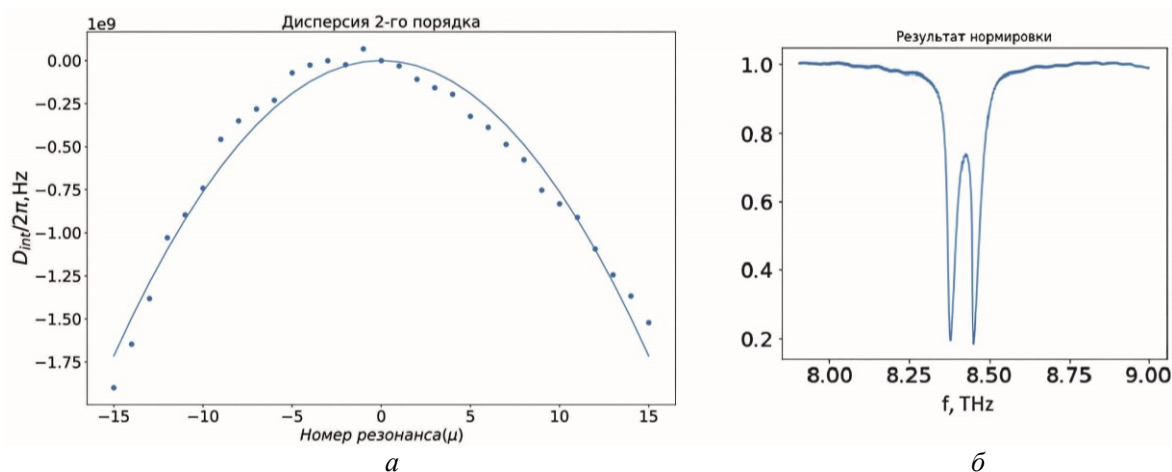


Рис. 3. Отклонение по частоте  $\mu$ -й моды от центральной моды резонатора после вычета линейной части (а); резонансный провал на резонансной частоте (б)

На рис. 3 представлены данные об измеренных частотах резонансов, которые демонстрируют квадратичный ход, т. е. дисперсию групповой скорости эффективного показателя преломления материала кольца. В данном эксперименте дисперсия групповой скорости составляет  $-15,2$  МГц. Имеет место также и кубичный вклад. Спектральные ширины резонансов позволяют оценить их добротность. В нашем случае она составляет  $5,4 \cdot 10^5$ .

В процессе температурных измерений (при вариации температуры кольца на чипе) было установлено, что смещение резонансных частот при изменении температуры микрорезонатора составляет около  $1$  МГц/мК.

### Литература

1. *Voloshin A. S., Kondratiev N. M., Lihachev G. V.* [et al.] Dynamics of soliton self-injection locking in optical microresonators // Nat. Commun. 2021. V. 12: 235. DOI: 10.1038/s41467-020-20196-y.
2. *Дмитриев Н. Ю., Волошин А. С., Кондратьев Н. М.* [et al.] Определение дисперсионных характеристик интегральных оптических микрорезонаторов и генерация в них когерентных оптических частотных гребенок // ЖЭТФ, 2022. Т. 162. № 1. С. 14–26.

## Уменьшение перекрестных помех между интегральными анизотропными оптическими волноводами

*Д. В. Грудинин*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Минимизация волноводных перекрестных помех — давняя задача для инженеров-оптиков. В настоящее время наиболее популярным методом подавления перекрестных помех являются анизотропные наноструктуры, реализованные в виде субволновых полос между волноводами [1–3]. Однако влияние анизотропии материала на эффективность таких структур остается неизвестным. В данной работе мы рассматриваем волноводы MoS<sub>2</sub>, разделенные полосками MoS<sub>2</sub> (рис. 1), поскольку этот материал имеет рекордное значение оптической анизотропии [4].

В этой работе были проведены численные расчеты влияния субволновых неоднородных полос из MoS<sub>2</sub>, размещенных между волноводами, для случая из одной и двух полос.

Мы обнаружили, что использование MoS<sub>2</sub> вместо Si [5] приводит к увеличению расстояния перекрестных помех на несколько порядков. Таким образом, мы предполагаем, что, сочетая исключительные свойства материала с известными методами подавления перекрестных помех, можно сделать плотность интеграции фотонных устройств близкой к электронной.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-29-01192).

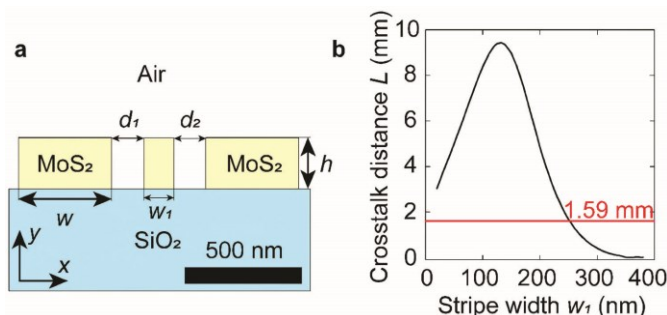


Рис. 1. Однополосная структура: *a* — схематический вид оптимизированной структуры; *b* — соотношение между длиной муфты и шириной полосы. Красная линия — длина связи в исходной структуре с двумя волноводами и без дополнительных полос

### Литература

1. Zhang J. [et al.]. Ultra-compact, efficient and high-polarization-extinction-ratio polarization beam splitters based on photonic anisotropic metamaterials // Opt. Express. 2022. V. 30. P. 538–549.
2. Shi X. [et al.]. Compact low-birefringence polarization beam splitter using vertical-dual-slot waveguides in silicon carbide integrated platforms // Photonics Res. 2022. V. 10(1). P. A8–A13.
3. Su L. [et al.]. Inverse design and demonstration of a compact on-chip narrowband three-channel wavelength demultiplexer // ACS Photonics. 2018. V. 5(2). P. 301–305.
4. Ermolaev G. A. [et al.]. Giant optical anisotropy in transition metal dichalcogenides for next-generation photonics // Nat. Commun. 2021. V. 12(1): 854.
5. Yang Y. [et al.]. Crosstalk reduction of integrated optical waveguides with nonuniform subwavelength silicon strips // Sci. Rep. 2020. V. 10(1): 4491.

## Ионно-лучевой метод создания монокристаллических наночастиц серебра для повышения стабильности плазмонных свойств наноструктур

*Н. В. Дорошина<sup>1</sup>, О. А. Стрелецкий<sup>2</sup>, В. В. Сычев<sup>3</sup>, Д. И. Якубовский<sup>1</sup>, М. С. Миронов<sup>1</sup>, А. А. Воронов<sup>1</sup>,  
А. В. Арсенин<sup>1</sup>, В. В. Волков<sup>1</sup>, С. М. Новиков<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Московский государственный университет

<sup>3</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

В данной работе приводятся результаты исследования технологии ионно-лучевой модификации для создания монокристаллических наночастиц серебра со стабильными плазмонными свойствами. Спектроскопия ГКР показала, что полученные ансамбли наночастиц серебра сохраняют стабильные плазмонные свойства не менее 39 дней и обладают высоким коэффициентом усиления, который сохраняется в течение 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. ТЭМ-изображения НЧ-серебра, полученные с помощью отжига (поликристаллические) и с помощью ионно-лучевой модификации (монокристаллические) приведены на рис. 1.

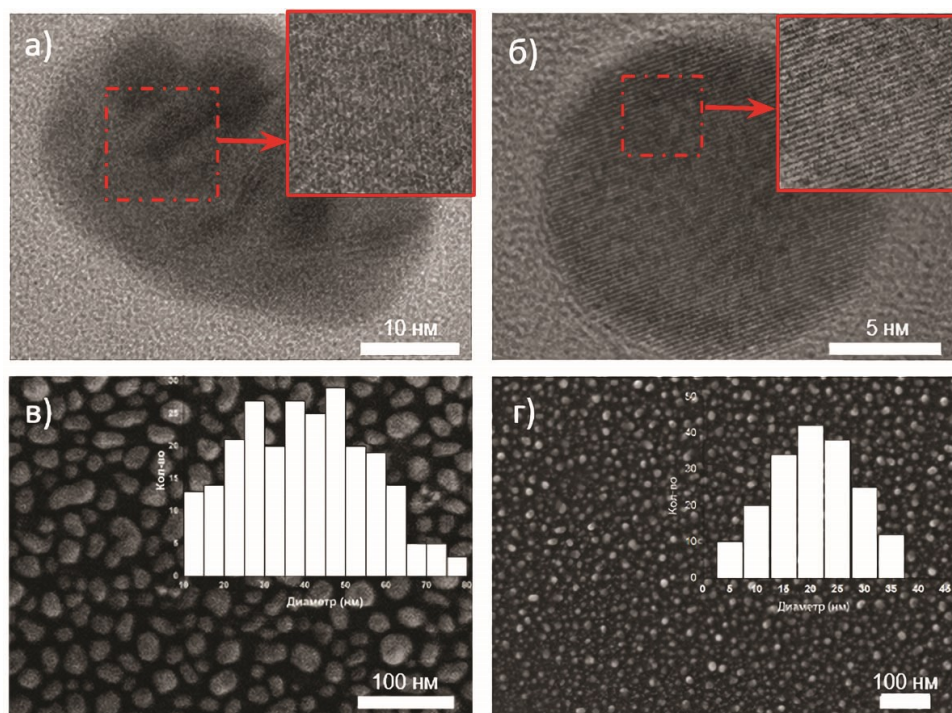


Рис. 1. ТЭМ-изображения: *а* — поликристаллической наночастицы Ag спустя 14 дней после изготовления; *б* — монокристаллической наноструктуры Ag спустя 14 дней после изготовления; *в*, *г* — наноструктуры и гистограмма соответственно

Интенсивность и спектральное положение плазмонного резонанса изготовленных наночастиц регистрировали в течение 39 дней (рис. 1*а*). 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 10% от исходной интенсивности, что демонстрирует стабильность оптических свойств. 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.

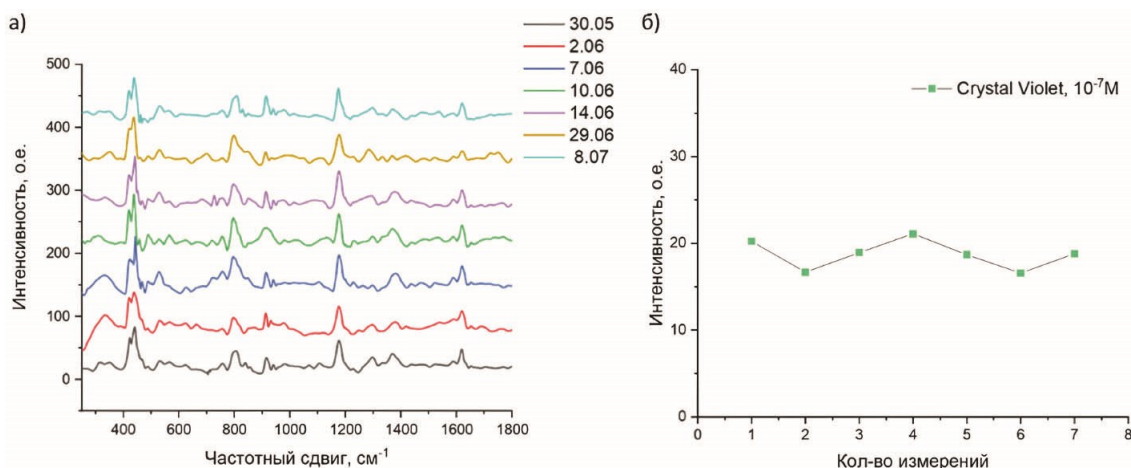


Рис. 2. ГКР-спектры Crystal Violet, полученные с монокристаллических Ag-наноструктур (а); статистика измерений в течение 39 дней (б)

В ходе исследования было подтверждено, что монокристаллические НЧ серебра устойчивы к окислению благодаря своей монокристаллической структуре. Высокий коэффициент усиления ГКР, сохраняющийся в течение более одного месяца хранения в атмосфере окружающей среды, свидетельствует об их более высокой эффективности по сравнению с поликристаллическими НЧ серебра, которые теряют эффективность уже на третий день измерений.

### Литература

1. Cao W., Elsayed-Ali H. E. Stability of Ag nanoparticles fabricated by electron beam lithography // Mater. Lett. 2009. V. 63. P. 2263–2266.
2. Novikov S. M. [et al.]. Highly stable monocrystalline silver clusters for plasmonic applications // Langmuir. V. 33(24). P. 6062–6070.
3. Hartmann H. [et al.]. Design and capabilities of an experimental setup based on magnetron sputtering for formation and deposition of size-selected metal clusters on ultra-clean surfaces // Rev. Sci. Instrum. 2012. V. 83: 073304.
4. Han Y. [et al.]. Effect of oxidation on surface-enhanced raman scattering activity of silver nanoparticles: a quantitative correlation // Anal. Chem. 2011. V. 83(15). P. 5873–5880.

УДК 535-46

## Гигантская оптическая анизотропия ван-дер-ваальсовых материалов и их приложения в фотонике следующего поколения

Г. А. Ермолаев

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Анизотропные оптические эффекты активно применяются повсеместно, начиная с викингов, которые использовали исландский шпат для нахождения солнца на небе и, соответственно, навигации [1], и заканчивая современными жидкокристаллическими дисплеями, в которых жидкий кристалл помещается между скрещенными поляризаторами и управляется посредством приложения электрического поля для настройки оптической фазы между обыкновенным и необыкновенным лучами [2]. Как следствие,

анизотропные оптические эффекты определяются оптической анизотропией используемых материалов и зависят от разницы оптических фаз  $\Delta\varphi$  между обычными и необычными лучами. Разность фаз  $\Delta\varphi$  в основном определяется толщиной анизотропного материала  $t$  и его значением двулучепреломления  $\Delta n$ , менее 0,4 [4, 5]. В этой связи появление слоистых ван-дер-ваальсовых материалов, таких как дисульфиды молибдена и вольфрама, открывает новые возможности для анизотропной нанофотоники, поскольку их значения двулучепреломления  $\Delta n$  могут достигать 3,0, что почти на порядок выше, чем у рутила и кальцита [3]. В частности, нам удалось при помощи анизотропии ван-дер-ваальсовых материалов преодолеть дифракционный предел в волноведущих структурах [6] и увеличить длину взаимодействия соседних волноводов [7]. Таким образом, наши работы открывают новые горизонты физики для анизотропных материалов [8].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (№ 22-29-01192).

### Литература

1. *Roslund C., Beckman C.* Disputing Viking navigation by polarized skylight // *Appl. Opt.* 1994. V. 33. P. 4754–4755.
2. *Schadt M.* Liquid crystal materials and liquid crystal displays // *Annu. Rev. Mater. Sci.* 1997. V. 27. P. 305–379.
3. *Ermolaev G. A.* [et al.] Giant optical anisotropy in transition metal dichalcogenides for next-generation photonics // *Nat. Commun.* 2021. V. 12: 854.
4. *Sinton W. M.* Birefringence of rutile in the infrared // *J. Opt. Soc. Am.* 1961. V. 51(11). P. 1309–1310.
5. *Ghosh G.* Dispersion-equation coefficients for the refractive index and birefringence of calcite and quartz crystals // *Opt. Commun.* 1999. V. 163. P. 95–102.
6. *Ermolaev G.* [et al.] Van der Waals materials for subdiffractional light guidance // *Photonics.* 2022. V. 9(10): 744.
7. *Grudin G.* [et al.] Reduction in crosstalk between integrated anisotropic optical waveguides // *Photonics.* 2023. V. 10(1): 59.
8. *Ermolaev G. A.* [et al.] Giant and tunable excitonic optical anisotropy in single-crystal halide perovskites // *Nano Lett.* 2023. V. 23(7). P. 2570–2577.

УДК 533.3

### Экситон-поляритонное резонансное оптическое отражение системой из 30 квантовых ям GaN/AlGaIn при комнатной температуре

*А. А. Иванов, В. В. Чалдышев*

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе

Периодическая модуляция диэлектрической проницаемости среды, приводящая к брэгговской дифракции, может быть достигнута как изменением показателя преломления в периодической структуре (брэгговский отражатель), так и за счет экситонов в квантовых ямах (КЯ) (резонансная брэгговская структура (РБС)). В РБС из  $N$  КЯ электромагнитное связывание экситонов приводит к формированию одной сверхизлучательной моды и  $N - 1$  субизлучательных мод [1]. Данный эффект можно наблюдать даже при комнатной температуре, если использовать материалы III–N, в которых экситоны Ванье–Мотта имеют большие энергии связи и большие силы осциллятора в сравнении с традиционными материалами  $A_{III}B_V$  [2]. Поскольку экситоны в КЯ чувствительны к внешнему воздействию, например электрическому полю, то РБС могут быть использованы как управляемые брэгговские отражатели. РБС на основе III–N обладают наилучшими параметрами для практического применения в сравнении с исследованными РБС на основе других систем материалов.

Мы сообщаем о результатах экспериментального и теоретического анализа РБС из 30 КЯ GaN/AlGaIn, имеющей рекордное число периодов для данной системы материалов на сегодняшний день. Образец был выращен методом газовой эпитаксии из металлоорганических соединений на подложке сапфира (0001). Измерения спектров оптического отражения проводились для различных углов падения и поляризаций света при комнатной температуре. Численные расчеты оптических свойств (рис. 1) проводились с использованием метода матрицы переноса.

На рис. 1 представлены экспериментальные и расчетные спектры отражения от РБС из 30 КЯ GaN/AlGaIn для  $S$ -поляризованного света, падающего под углом  $30^\circ$  (а) и  $45^\circ$  (б), при комнатной температуре. Спектры демонстрируют резонансные особенности на фоне спектрально-независимого отражения от поверхности образца. Уровень фонового отражения зависит от угла падения света согласно формулам Френеля. Антиотражающее покрытие нами не использовалось. Настраивая угол падения света, мы

изменяем положение брэгговского резонанса, в то время как положение экситонного резонанса остается неизменным. Рис. 1а демонстрирует ситуацию, когда резонансы расстроены друг относительно друга (спектральное положение экситонного резонанса показано на рисунке вертикальной оранжевой точечной линией на длине волны 343,9 нм). При увеличении угла падения света положение брэгговского пика смещается в коротковолновую часть спектра. На рис. 1б показаны экспериментальные и расчетные спектры отражения, когда резонансы настроены друг на друга. Из сравнения рис. 1а и 1б видно, что когда одновременно выполняются условия экситонного и брэгговского резонансов, амплитуда и ширина пика отражения значительно возрастают.

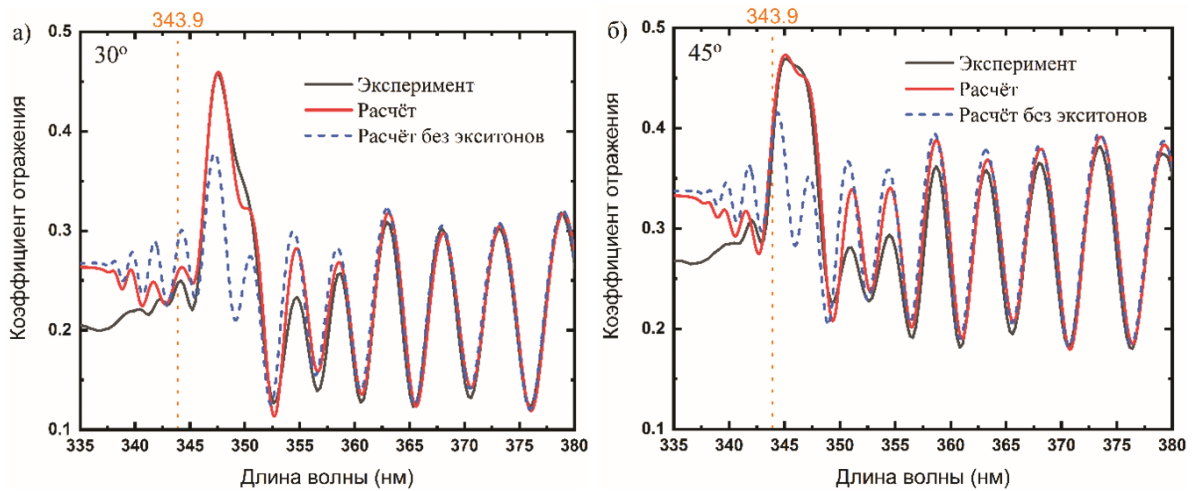


Рис. 1. Экспериментальные и расчетные спектры отражения  $S$ -поляризованного света, падающего под углом  $30^\circ$  (а) и  $45^\circ$  (б), от РБС из 30 КЯ GaN/AlGaN при комнатной температуре. Черная линия — эксперимент, красная линия — расчет с учетом экситонов в КЯ, синяя штриховая линия — расчет без экситонов в КЯ. Спектральное положение экситонного резонанса — оранжевая пунктирная линия (343,9 нм)

Сравнивая экспериментальные и расчетные спектры отражения (черная и красная линия) с результатами расчетов без учета экситонных эффектов (синяя штриховая линия), можно сделать вывод, что доминирующий вклад в резонансное отражение вносят экситоны в КЯ. Из численных расчетов были определены следующие экситонные параметры: параметр радиационного и нерадиационного затухания в КЯ GaN  $0,4 \pm 0,02$  мэВ и  $40 \pm 5$  мэВ соответственно. Параметр радиационного затухания при равных величинах нерадиационного затухания экситонов в КЯ GaN/AlGaN оказывается в два раза больше по сравнению с КЯ InGaN/GaN [3].

Резонансное взаимодействие света с экситонами в РБС может быть усилено за счет увеличения числа КЯ в периодической последовательности. Однако в работе [4] было показано, что с ростом числа периодов условие эквидистантности становится все более строгим, а в реальных структурах — невыполнимым. Поэтому поиск системы материалов, обеспечивающей рекордные показатели радиационного затухания квазидвумерных экситонов, является крайне актуальным. В данной работе показано, что система материалов GaN/AlGaN обеспечивает лучшее на сегодняшний день отношение радиационного затухания к нерадиационному для экситонов в КЯ.

## 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.* [et al.] Optical lattices of InGaN quantum well excitons // Appl. Phys. Lett. 2011. V. 99(25): 251103.
3. *Bolshakov A. S., Chaldyshev V. V., Zavarin E. E.* [et al.] Room temperature exciton-polariton resonant reflection and suppressed absorption in periodic systems of InGaN quantum wells // J. Appl. Phys. 2017. V. 121(13): 133101.
4. *Ivanov A. A., Chaldyshev V. V., Ushanov V. I.* [et al.] Critical spatial disorder in InGaN resonant Bragg structures // Appl. Phys. Lett. 2022. V. 121(4): 041101.

## Функционально-полный набор оптомагнитных логических элементов

А. А. Колосветов<sup>1,2</sup>, А. И. Чернов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Российский квантовый центр

Интерес к новым платформам для обработки информации породил несколько многообещающих концепций, в том числе устройства, основанные на спиновых степенях свободы [1]. К их преимуществам можно отнести работу при комнатной температуре и отсутствие омического нагрева. Более того, спин-волновая компьютерная логика допускает миниатюризацию вплоть до нанометровых размеров [2] и достижение терагерцевых частот [3]. С развитием методов сверхбыстрого оптического возбуждения осцилляций намагниченности [4] стало возможным создавать спин-волновые устройства, обладающие высокими скоростями работы и различной пространственной конфигурацией. Оптомагнитный элемент XNOR (исключающее или) — это первое устройство такого класса [5], которое, однако, не является минимальным набором логических элементов. В этой статье мы представляем концепцию элемента NOR («отрицание или»), который, в отличие от своего предшественника, формирует функционально-полный логический набор, т. е. с помощью NOR и его комбинаций можно выполнить любую логическую операцию.

Динамику намагниченности в ферромагнитном материале описывает уравнение Ландау–Лифшица–Гильберта (ЛЛГ):

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma\vec{M} \times \vec{H}_{\text{eff}} - \frac{\alpha}{M_{\text{sat}}}\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt}, \quad (1)$$

где  $t$  — время,  $\gamma$  — гиромагнитное отношение электрона,  $\alpha$  — постоянная затухания Гильберта,  $M_{\text{sat}}$  — намагниченность насыщения,  $\vec{H}_{\text{eff}}$  — эффективное поле. Лазерные импульсы с круговой поляризацией возбуждают спиновые волны с помощью обратного эффекта Фарадея (ОЭФ) [4]. Из-за спин-орбитальной природы эффекта эффективное поле ОЭФ существует в системе только во время прохождения пучка через объем образца, что позволяет достичь высокой скорости выполнения операций вплоть до одной операции за 300 фс [5].

Экспериментальная установка, используемая для создания элемента NOR, состоит из схемы оптической накачки–зондирования (рис. 1а) и пленки, намагниченной однородным внешним полем выше величины насыщения. Пространственное распределение поля пучков накачки контролируется пространственным модулятором света. Пучки накачки имеют круговую поляризацию и фокусируются на образце в пятна диаметром 10 мкм. Попадая на образец, импульсы с круговой поляризацией возбуждают прецессию намагниченности [4], которая считывается зондирующими импульсами при помощи эффекта Фарадея. В качестве образца использовалась пленка  $(\text{LuYBi})_3(\text{FeGa})_5\text{O}_{12}$  толщиной 2,2 мкм. Численная модель пленки была построена на платформе Muph3, основанной на уравнении ЛЛГ (1). Пленка была разделена на  $2^{18}$  микромагнитов с намагниченностью насыщения  $M_{\text{sat}} = 103$  кА/м и кубической анизотропией  $K_u = 800$  Дж/м<sup>3</sup>.

Как и в оптомагнитном XNOR [5], входными битами информации являются поляризации первого и второго пучков накачки, а выходным битом — амплитуда осцилляций  $M_z$  в области зондирования (рис. 1б). Третий (вспомогательный) пучок накачки всегда имеет  $\sigma^-$ -поляризацию и не кодирует никакой информации. Первый и второй пучки накачки фокусируются в одной и той же точке на поверхности пленки. Когда эта точка и центр третьего пучка равноудалены от центра области зондирования, выполняется условие интерференции: волны, возбуждаемые первыми двумя и третьим пучками накачки, приходят в область зондирования с одинаковой фазой. Когда первый и второй пучки накачки имеют одинаковую поляризацию, можно наблюдать конструктивную интерференцию (рис. 1б). Деструктивная интерференция возникает в случае двух  $\sigma^+$ -поляризованных лучей. Когда два первых пучка имеют противоположную поляризацию, интерференция не наблюдается. Большой амплитудный разрыв между случаем двух  $\sigma^-$ - и тремя другими случаями для  $y = -12$  мкм обеспечивает точное считывание данных и согласуется с таблицей истинности логического элемента NOR (рис. 1в).

В данной работе мы демонстрируем концепцию оптомагнитного логического элемента NOR, который сам по себе является функционально-полным набором логических элементов. Дальнейшие исследования будут посвящены миниатюризации описанного NOR и объединению групп элементов в логические цепи.

Работа была поддержана проектом РФФ № 21-12-00316.



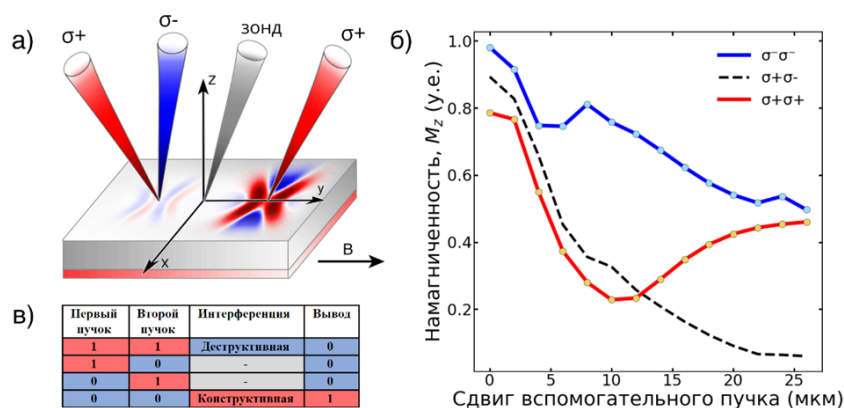


Рис. 1. Схема накачка–зондирование (а). Центры первого и второго пучков накачки зафиксированы в одной точке  $y = 12$  мкм, в то время как третий, вспомогательный пучок накачки перемещается вдоль оси  $y$ . Зонд зафиксирован в  $y = 0$  мкм. Амплитуда колебаний намагниченности  $M_z$  в зависимости от сдвига вспомогательного пучка накачки (б). Первый и второй пучки имеют  $\sigma^-$ -поляризацию (синяя линия),  $\sigma^+$ -поляризацию (красная линия) и различную поляризацию (черная пунктирная линия). Таблица истинности вентиля NOR (в):  $\sigma^+$ -поляризация соответствует логическому вводу «1»,  $\sigma^-$  соответствует «0». Конструктивная интерференция соответствует логическому выводу «1», деструктивная интерференция или отсутствие интерференции соответствуют «0»

### Литература

1. Csaba G., Papp A., Porod W. Perspectives of using spin waves for computing and signal processing // Phys. Lett. A. 2017. V. 381. P. 1471–1476.
2. Chernov A. I. [et al.]. All-dielectric nanophotonics enables tunable excitation of the exchange spin waves // Nano Lett. 2020. V. 20. P. 5259–5266.
3. Hortensius J. R. [et al.]. Coherent spin-wave transport in an antiferromagnet // Nat. Phys. 2021. V. 17. P. 1001–1006.
4. Kimel A. V. [et al.]. Ultrafast non-thermal control of magnetization by instantaneous photomagnetic pulses // Nature. 2005. V. 435 P. 655–657.
5. Kolosvetov A. [et al.]. Concept of the optomagnonic logic operation // Phys. Rev. Appl. 2022. V. 18: 054038.

УДК 533.922

## Широкополосные оптические свойства наночастиц на основе карбида титана (MXene)

И. С. Казанцев, Д. А. Панова, Г. А. Ермолаев, Г. И. Целиков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Исключительные оптические, электрические и механические свойства слоистых карбидов, нитридов и карбонитридов переходных металлов, называемых максены (MXene) [1], произвели революцию в материаловедении. Среди них наибольшее внимание привлек  $Ti_3C_2$  благодаря развитым методам синтеза и обработки, высокой проводимости и ярко выраженному оптическому отклику. Помимо фундаментального значения, этот оптический отклик открывает путь для тераностических приложений, как мы продемонстрировали на примере наносфер  $Ti_3C_2$ .

В данной работе продемонстрирован синтез сферических наночастиц карбида титана  $Ti_3C_2$  методом фемтосекундной импульсной лазерной фрагментации в жидкости. Метод лазерной фрагментации позволяет решить проблему создания частиц сферической формы, обеспечивая быстрый, простой и экологичный метод синтеза высококачественных и стабильных растворов наночастиц на основе максенов, которые могут служить альтернативой кремнию в задачах нанопотоники [2], нанотераностике и биомедицине [3]. В результате проведенного исследования показано, что полученные наночастицы сохраняют слоистую кристаллическую структуру исходной мишени на наномасштабе, поглощают свет видимого диапазона и свет в окнах прозрачности человеческих тканей.

С учетом недавнего успеха в изготовлении наносфер дихалькогенидов переходных металлов, которые сохраняют кристаллическую структуру и оптический отклик объемного материала [4], в данной работе выдвинуто предложение использовать наночастицы  $Ti_3C_2$  в качестве агентов для тераностики раковых новообразований. В результате исследования было обнаружено, что наносферы  $Ti_3C_2$  могут одновременно резонансно поглощать излучение в двух важных биомедицинских терапевтических спектраль-

ных окнах. В первом окне (700–980 нм)  $Ti_3C_2$  превосходит золото, кремний и конкурирует с нитридом титана. Между тем во втором окне (1100–1700 нм), которое имеет больший потенциал для лечения рака,  $Ti_3C_2$  превосходит все другие материалы с большим отрывом.

Для демонстрации фототермического отклика коллоидных наночастиц  $Ti_3C_2$  в воде нами регистрировалась температура раствора при его возбуждении непрерывным лазерным излучением на длине волны 830 нм мощностью 1,2 Вт. При этом концентрация наночастиц в растворе составляла 180 мкг/мл. Было показано, что в течение 15 мин температура раствора выросла на 30°. Полученные результаты демонстрируют возможность использования наночастиц  $Ti_3C_2$  для фототермических применений.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00094.

### Литература

1. *Naguib M.* [et al.]. Two-dimensional nanocrystals produced by exfoliation of  $Ti_3AlC_2$ // *Adv. Mater.* 2011. V. 23(37). P. 4248–4253.
2. *Mak K. F., Shan J.* Photonics and optoelectronics of 2D semiconductor transition metal dichalcogenides//*Nat. Photonics.* 2016. V. 10. P. 216–226.
3. *Wu H., Yang R., Song B.* [et al.] Biocompatible inorganic fullerene-like molybdenum disulfide nanoparticles produced by pulsed laser ablation in water// *ACS Nano.* 2011. V. 5(2). P. 1276–1281.
4. *Tselikov G. I.* [et al.] Transition metal dichalcogenide nanospheres for high-refractive-index nanophotonics and biomedical theranostics//*Proc. Natl. Acad. Sci.* 2022. V. 119(39).

УДК. 53.01

## Изучение эффекта Казимира в системе с золотыми пластинками, помещенными в раствор СТАВ-а

*Д. Г. Баранов, М. И. Краснов*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В 1948 г. Генрих Казимир предсказал эффект притяжения двух незаряженных идеально проводящих зеркал в вакууме вследствие вакуумных флуктуаций электромагнитного поля [6]. Впоследствии этот эффект был аналитически описан для систем, включающих не только идеальные проводники, но и произвольные материалы [1]. С течением времени было исследовано теоретически и проверено экспериментально множество конфигураций данного феномена. При этом в большинстве своем наблюдается именно притягивающий эффект. 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 [2–4]. Первые два способа очень сложны и громоздки по вычислениям, так что мы решили описать систему, обладающую еще и сторонним, электростатическим взаимодействием с дебаевским экранированием [5].

В данном докладе мы представим результаты, подробно описывающие поведение системы из двух золотых пластин, погруженных в раствор СТАВ-а. Мы описывали как просто потенциал системы (смотрели на экстремумы в зависимости от концентрации раствора), так и делали симуляции динамики движения пластин при конечной температуре. Получилось, что потенциал системы сильно зависит от концентрации СТАВ-а.

Данные результаты могут помочь в изучении других интересных оптико-механических динамических систем, в которых немонотонность потенциала основана на дебаевском экранировании.

### Литература

1. *Klimchitskaya G. L., Mohideen U., Mostapanenko V. M.* The Casimir force between real materials: Experiment and theory//*Rev. Mod. Phys.* 2009. V. 81. P. 1827–1885.
2. *Tang L.* [et al.]. Measurement of non-monotonic Casimir forces between silicon nanostructures//*Nat. Photonics.* 2017. V. 11. P. 97–101.
3. *Zhao R.* [et al.]. Stable Casimir equilibria and quantum trapping//*Science.* 2019. V. 364. P. 984–987.
4. *Munkhbat B.* [et al.]. Casimir microcavities for tunable self-assembled polaritons//*Nature.* 2021. V. 597. P. 214–219.
5. *Grahame D. C.* The electrical double layer and the theory of electrocapillarity//*Chem. Rev.* 1947. V. 41(3). P. 441–501.
6. *Casimir H. B. G.* On the attraction between two perfectly conducting plates//*Kon. Ned. Akad. Wetensch. Proc.* 1948. V. 51. P. 793–795.

## Фотолюминесценция двумерных наноллистов MoS<sub>2</sub>, полученных методом жидкостной эксфолиации

М. Ю. Лукьянов, С. А. Евлашин

Сколковский институт науки и технологий

Природное изобилие дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ), а также их перестраиваемая запрещенная зона, расположенная в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах, делают их идеальными кандидатами для будущих оптоэлектронных устройств. Например, запрещенная зона MoS<sub>2</sub> изменяется от непрямой (равной 1,1 эВ) в объемной форме до прямой (равной 1,9 эВ) при уменьшении толщины до монослоя [1]. Благодаря такому переходу MoS<sub>2</sub> используется в качестве основного материала для оптических сенсоров, полевых транзисторов, однофотонных эмиттеров и сверхчувствительных фотодетекторов.

На текущий момент жидкофазная эксфолиация (ЖФЭ) является самым перспективным методом синтеза ДПМ с точки зрения производства в промышленных масштабах. ЖФЭ MoS<sub>2</sub> может быть осуществлена с помощью соникации или под действием сдвигового напряжения. Помимо выбора типа физической обработки, ЖФЭ предусматривает выбор растворителей и поверхностно-активных веществ, которые во многом определяют эффективность эксфолиации и качество полученных наноллистов [2]. Наиболее популярным подходом является использование высокополярных растворителей, включая N-метилпирролидон (NMP), N-диметилформамид (DMF) и некоторые другие. Другими экологически чистыми альтернативами являются водные среды с различными поверхностно активными веществами — холатом натрия, дезоксихолатом натрия или полимерами. Добавление поверхностно-активного вещества создает оболочку вокруг наноллистов, что предотвращает их агрегацию, стабилизирует полученный раствор и позволяет достичь высокой скорости производства.

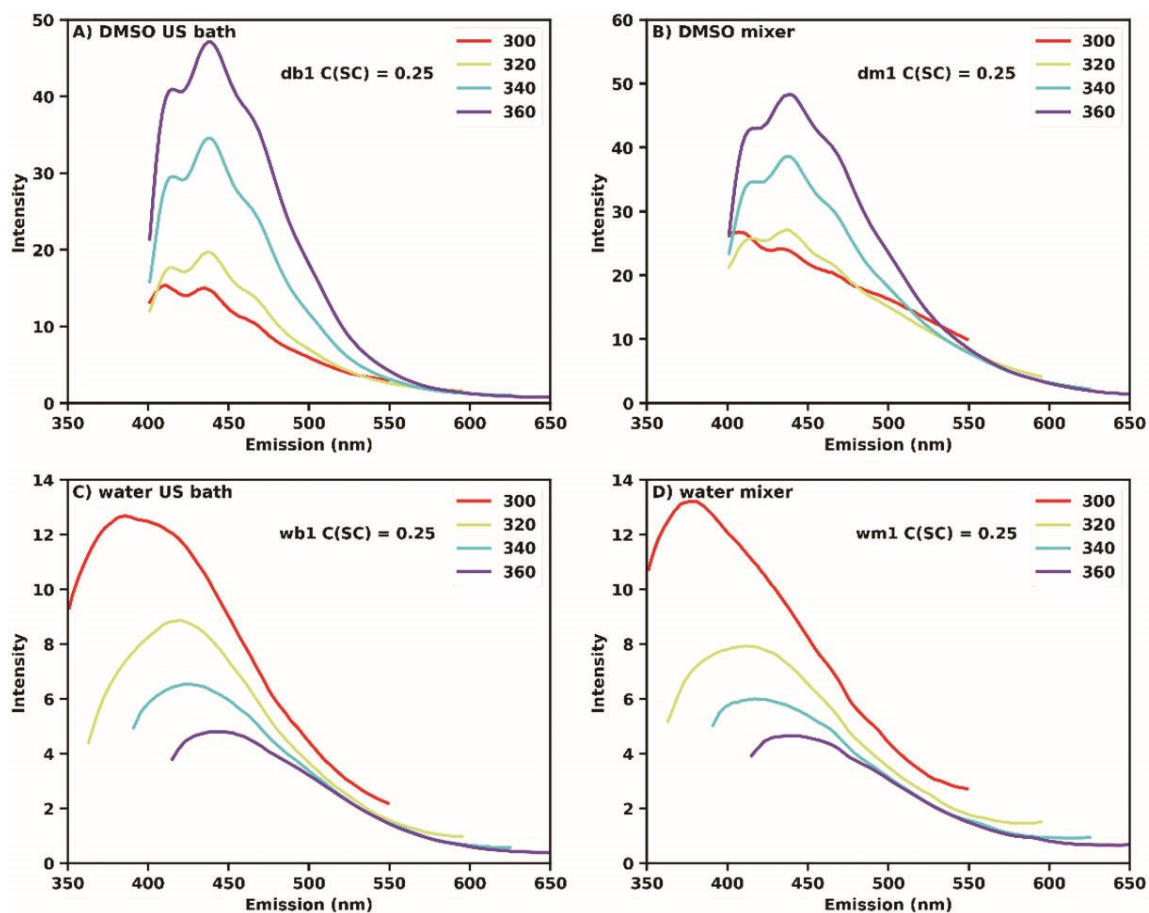


Рис. 1. Спектры фотолюминесценции для дисперсий эксфолиированных наноллистов MoS<sub>2</sub>, полученных: *A* — путем соникации в ванне в ДМСО; *B* — путем сдвигового перемешивания в ДМСО; *C* — путем соникации в ванне в воде; *D* — путем сдвигового перемешивания в воде, полученных с одинаковой начальной концентрацией SC ( $C(SC) = 0,25$  мг/мл) и порошка MoS<sub>2</sub> ( $C(MoS_2) = 2,5$  мг/мл)

В настоящее время химическая функционализация и модификация поверхности эксфолированного  $\text{MoS}_2$  различными металлами, солями, органическими и полимерными молекулами для улучшения каталитических и фотолюминесцентных свойств является сложной задачей [3]. Однако до сих пор не проводились исследования зависимости фотолюминесцентных свойств растворов  $\text{MoS}_2$  от концентрации ПАВ, что имеет практическое значение для создания электроники на основе ДПМ и получения тонких пленок путем осаждения эксфолиированных наноллистов на подложку [4]. Целью данной работы является определение влияния холата натрия как наиболее распространенного ПАВ на оптические (электронные) свойства эксфолиированного  $\text{MoS}_2$ .

Для сравнения люминесцентных свойств наноллистов  $\text{MoS}_2$ , полученных с помощью ЖФЭ, были произведены четыре серии образцов с различными начальными концентрациями холата натрия  $\text{C}(\text{SC})$ : наноллисты  $\text{MoS}_2$  в водных растворах и ДМСО, полученных с помощью ультразвуковой ванны и миксера со сдвиговым напряжением. Для каждого из образцов были получены спектры фотолюминесценции и соответствующие спектры экстинкции. На рис. 1 представлены спектры фотолюминесценции образцов, приготовленных с одинаковой начальной концентрацией  $\text{MoS}_2$  и  $\text{SC}$ , но с вариациями в растворителе и типе физической обработки. Использование ДМСО в качестве растворителя не позволило анализировать люминесцентные свойства дисперсии наноллистов  $\text{MoS}_2$  из-за сильного фонового сигнала растворителя. Пики, наблюдаемые на рис. 1А,В, а также общий профиль спектров сохраняют свое положение независимо от волны возбуждения. В то же время для дисперсий  $\text{MoS}_2$  в воде увеличение длины волны возбуждения приводит к заметному красному сдвигу спектров люминесценции рис. 1С,Д.

Зависимая от возбуждения фотолюминесценция предполагает полидисперсную природу водных дисперсий  $\text{MoS}_2$ , что характерно для метода ЖФЭ. Наблюдаемая эмиссия спектра фотолюминесценции объясняется высвобождением энергии за счет рекомбинации электронно-дырочных пар. Природа вышеупомянутых пар обусловлена нескомпенсированным зарядом на дефектах типа оборванных связей, формирующихся при росте кристаллической структуры. Анализ полученных спектров не позволил установить наличие корреляции между методом синтеза и интенсивностью фотолюминесценции в диапазоне длин волн возбуждения от 300 до 360 нм.

Для характеристики латерального размера и толщины наноллистов были использованы метрики, свойственные для ультрафиолетового и видимого диапазонов, подробно описанные Backes и др. [5]. Результаты измерений, полученные с помощью атомно-силового микроскопа, подтвердили достоверность значений размеров наноллистов  $\text{MoS}_2$ , полученных из спектров оптической экстинкции.

Данный проект был выполнен при поддержке фонда РФФ, грант № 22-73-10198.

## Литература

1. *Tongay S.* [et al.]. Thermally driven crossover from indirect toward direct bandgap in 2D semiconductors:  $\text{MoSe}_2$  versus  $\text{MoS}_2$ // *Nano Lett.* 2012. V. 12(11). P. 5576–5580.
2. *Fernandes J., Nemala S. S., Bellis G. De, Capasso A.* Green solvents for the liquid phase exfoliation production of graphene: the promising case of cyrene//*Front. Chem.* 2022. V. 10: 878799.
3. *Wu X., Gong K., Zhao G., Lou W., Wang X., Liu W.* Surface modification of  $\text{MoS}_2$  nanosheets as effective lubricant additives for reducing friction and wear in poly- $\alpha$ -olefin//*Ind. Eng. Chem. Res.* 2018. V. 57(23). P. 8105–8114.
4. *Coleman J. N.* [et al.]. Two-dimensional nanosheets produced by liquid exfoliation of layered materials//*Science.* 2011. V. 331(6017). P. 568–571.
5. *Backes C.* [et al.]. Edge and confinement effects allow in situ measurement of size and thickness of liquid-exfoliated nanosheets//*Nat. Commun.* 2014. V. 5(1): 4576.

УДК 538.958

## Электронные, оптические и морфологические свойства квазидвумерных пленок золота

*М. С. Миронов, Д. И. Якубовский, И. С. Казанцев*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Квазидвумерные пленки металлов (толщина менее 5 нм) представляют интерес для научных и технических приложений. Примерами могут служить различные фундаментальные свойства квантово-размерных металлических наноструктур и элементная база прозрачной и гибкой электроники [1–3]. Такие квазидвумерные металлические пленки могут использоваться в качестве основы сенсоров на поверхности кожи, характеризующихся высокой чувствительностью в сравнении с традиционными, прозрачными и

гибких электронных устройств, а также интерфейсов типа человек–компьютер и компьютер–человек [4]. Все эти перспективные приложения требовательны к уменьшению толщины проводящих структур (сохранение высокой проводимости при уменьшении толщины). Стандартное нанесение материала на подложку не позволяет добиться высокой прозрачности и проводимости одновременно в силу физико-химических особенностей кинетики роста. Как известно, при напылении металла на подложку может быть определен порог перколяции — минимальная толщина металла, которая необходима для получения проводящей пленки [5]. В настоящей работе продемонстрировано значительное снижение порога на примере пленок золота путем выбора подложки и процедуры изготовления.

Основной результат работы заключается в получении пленок золота толщиной менее 5 нм на площади более 1 см<sup>2</sup> практически на произвольных подложках (рис. 1а), отличающихся одновременно низким поверхностным сопротивлением (<40 Ω/□) и высоким прохождением в видимом диапазоне (в среднем >70%). На рис. 1б приведены спектры пропускания полученной пленки золота толщиной 3 нм и пленки ИТО в качестве сравнения при одной и той же проводимости около 40 Ω/□ [6]. На рис. 1в представлен сравнительный анализ морфологии получаемых пленок в сравнении с традиционными подходами к осаждению металлических пленок.

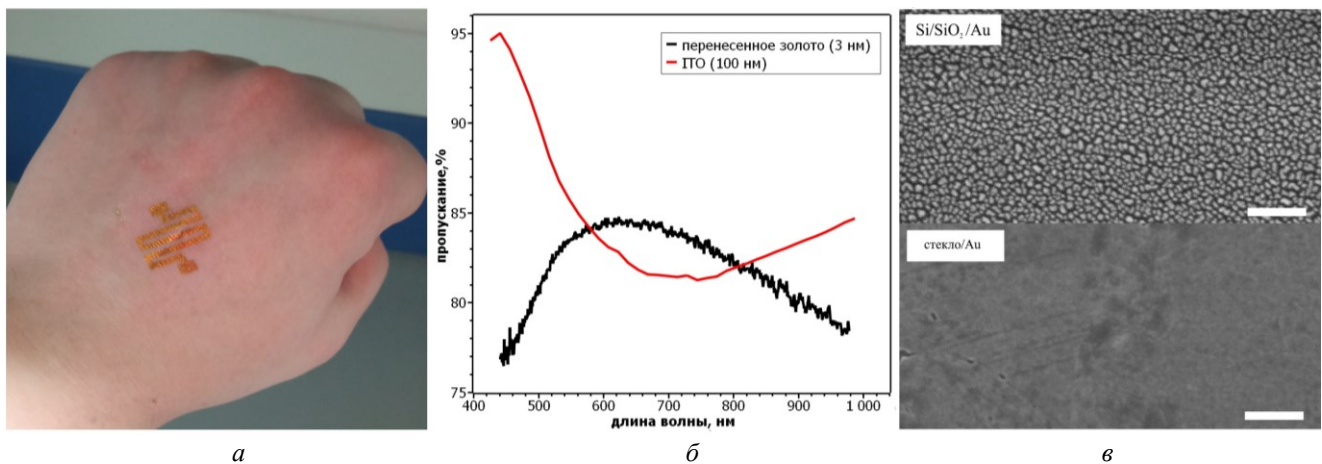


Рис. 4. Характеристика ультратонких пленок золота: а — пленка золота толщиной 60 нм на поверхности кожи; б — спектры пропускания пленок золота толщиной 3 нм и ИТО толщиной 100 нм [6], при этом проводимость обоих пленок ~40 Ω/□; в — изображения поверхности пленок золота на различных подложках, полученные с помощью растровой электронной микроскопии

### Литература

1. Yakubovsky D. I., Stebunov Y. V., Kirtaev R. V., Ermolaev G. A., Mironov M. S., Novikov S. M., Arsenin A. V., Volkov V. S. Ultrathin and ultrasmooth gold films on monolayer MoS<sub>2</sub> // Adv. Mater. Interfaces. 2019. V. 6(13): 1900196.
2. Maniyara R. A., Rodrigo D., Yu R. [et al.]. Tunable plasmons in ultrathin metal films // Nat. Photonics. 2019. V. 13. P. 328–333.
3. Volkov V. S., Yakubovsky D. I., Stebunov Y. V., Kirtaev R. V., Ermolaev G. A., Mironov M. S., Novikov S. M., Voronin K. V., Arsenin A. V. Ultra-thin gold films: Towards 2D metals for photonic and optoelectronic applications // J. Phys. Conf. Ser. 2020. V. 1461(1): 012184.
4. Hong W., Xiaohua M., Yue H. Electronic devices for human-machine interfaces // Adv. Mater. Interfaces. 2017. V. 4(4): 1600709.
5. Tatarkin D. E., Yakubovsky D. I., Ermolaev G. A., Stebunov Y. V., Voronov A. A., Arsenin A. V., Volkov V. S., Novikov S. M. Surface-enhanced raman spectroscopy on hybrid graphene/gold substrates near the percolation threshold // Nanomaterials. 2020. V. 10(1): 164.
6. Амосова Л. П. Электрооптические свойства и структурные особенности аморфного ИТО // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49. № 3. С. 426–430.

## Широкополосные оптические свойства карбида титана

Д. А. Панова, Г. А. Ермолаев, Г. И. Целиков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В 2011 г. учеными в Дрексельском университете было открыто новое семейство наноматериалов — максены — двумерные карбиды и нитриды титана [1]. Максены обладают металлическими свойствами, высокой проводимостью и считаются одними из самых перспективных материалов для накопления энергии в батареях и суперконденсаторах [2]. В то же время возможности применения максенов в фотонике изучены гораздо хуже, хотя ряд работ предлагает их использование в поверхностно усиленной спектроскопии комбинационного рассеяния [3], фототерапии рака [4], широкополосных поглотителях [5] и плазмонных устройствах [6]. Одним из препятствий на пути к изучению возможностей максенов в нанофотонике является значительное отличие (до 50%) в различных работах результатов измерений оптических констант одного из самых широко изучаемых максенов —  $Ti_3C_2$ . Более того, в настоящее время остаются неясны механизмы, лежащие в основе пика поглощения в карбиде титана на длине волны 800 нм, в то время как некоторые исследования [7, 8] предполагают, что это плазмонный резонанс, другие [5, 9] оспаривают это утверждение, выдвигая альтернативную гипотезу о межзонных переходах.

Для исследования оптического отклика  $Ti_3C_2$  в данной работе были проведены точные эллипсометрические измерения диэлектрической функции кристалла карбида титана в широком диапазоне от 300 до 3300 нм на тонкой пленке, изготовленной методом вакуумной фильтрации. Для подтверждения достоверности результатов было продемонстрировано хорошее согласие между измеренным и смоделированным спектром пропускания пленок  $Ti_3C_2$  различной толщины, а также были выполнены расчеты зонной структуры карбида титана. Проведенные исследования показали, что  $Ti_3C_2$  демонстрирует двойкий диэлектрическо-плазмонный отклик в широком спектральном диапазоне.

С учетом недавнего успеха в изготовлении наносфер дихалькогенидов переходных металлов, которые сохраняют кристаллическую структуру и оптический отклик объемного материала [10], в данной работе выдвинуто предложение использовать наночастицы  $Ti_3C_2$  в качестве агентов для тераностики раковых новообразований. В результате исследования было обнаружено, что наносферы  $Ti_3C_2$  могут одновременно резонансно поглощать излучение в двух важных биомедицинских терапевтических спектральных окнах. В первом окне (700–980 нм)  $Ti_3C_2$  превосходит золото, кремний и конкурирует с нитридом титана. Между тем во втором окне (1100–1700 нм), которое имеет больший потенциал для лечения рака,  $Ti_3C_2$  превосходит все другие материалы с большим отрывом благодаря локализованному плазмонному резонансу.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00094.

### Литература

1. *Naguib M.* [et al.]. Two-Dimensional Nanocrystals Produced by Exfoliation of  $Ti_3AlC_2$  // *Adv. Mater.* 2011. V. 23(37). P. 4248–4253.
2. *Anasori B., Lukatskaya M. R., Gogotsi Y.* 2D metal carbides and nitrides (MXenes) for energy storage // *Nat. Rev. Mater.* 2017. V. 2(2): 16098.
3. *Shevchuk K., Sarycheva A., Gogotsi Y.* Evaluation of two-dimensional transition-metal carbides and carbonitrides (MXenes) for SERS substrates // *MRS Bull.* 2022. V. 47(6). P. 545–554.
4. *Lin H.* [et al.]. Two-dimensional ultrathin mxene ceramic nanosheets for photothermal conversion // *Nano Lett.* 2017. V. 17(1). P. 384–391.
5. *Chaudhuri K.* [et al.]. Highly broadband absorber using plasmonic titanium carbide (MXene) // *ACS Photonics.* 2018. V. 5(3). P. 1115–1122.
6. *Velusamy D. B.* [et al.]. MXenes for plasmonic photodetection // *Adv. Mater.* 2019. V. 31(32): e1807658.
7. *Lioi D. B.* [et al.]. Simultaneous ultrafast transmission and reflection of nanometer-thick  $Ti_3C_2T_x$  MXene films in the visible and near-infrared: implications for energy storage, electromagnetic shielding, and laser systems // *ACS Appl. Nano Mater.* 2020. V. 3(10). P. 9604–9609.
8. *El-Demellawi J. K.* [ et al.] Tunable multipolar surface plasmons in 2D  $Ti_3C_2T_x$  MXene flakes // *ACS Nano.* 2018. V. 12(8). P. 8485–8493.
9. *Lashgari H.* [et al.]. Electronic and optical properties of 2D graphene-like compounds titanium carbides and nitrides: DFT calculations // *Solid State Commun.* 2014. V. 195. P. 61–69.
10. *Tselikov G. I.* [et al.]. Transition metal dichalcogenide nanospheres for high-refractive-index nanophotonics and biomedical theranostics // *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2022. V. 119(39).

## Исследование ультрабыстрых процессов в нанотрубках из дисульфида вольфрама

*М. И. Пауков<sup>1</sup>, А. Е. Гольдт<sup>2</sup>, П. Мишра<sup>1</sup>, Д. И. Якубовский<sup>1</sup>, А. В. Сюй<sup>1</sup>, А. А. Мельников<sup>3</sup>,  
Г. А. Командин<sup>4</sup>, А. Г. Насибулин<sup>2</sup>, А. В. Арсенин<sup>1</sup>, В. С Волков<sup>1</sup>, М. Г Бурданова<sup>1,5</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Сколковский институт науки и технологий

<sup>3</sup>Институт спектроскопии РАН

<sup>4</sup>Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН

<sup>5</sup>Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН

С момента открытия первого двумерного материала графена научное сообщество проявляет интерес к низкоразмерной физике, открывшей горизонты новых явлений [1–4]. В частности, особый интерес вызывают дихалькогениды переходных материалов, обладающие полупроводниковыми свойствами, которые позволяют манипулировать проводимостью устройств на их основе [5]. Особенно интересными с этой точки зрения являются одномерные наноматериалы, поскольку они обладают рядом контролируемых геометрических параметров — длиной, радиусом, типом скручивания решетки.

В отличие от двумерных материалов, их одномерные аналоги являются менее изученными. Одним из способов исследования таких наносистем является оптическая спектроскопия, которая позволяет установить фундаментальные физические процессы, происходящие при транспорте заряда и взаимодействии света с веществом. Особенность новых техник оптической спектроскопии заключается в разрешении ультрабыстрых процессов, происходящих в наноматериалах [6]. Понимание основ поведения носителей заряда при оптическом воздействии позволит проектировать оптоэлектронные устройства нового поколения. Таким образом, целью данной работы является изучение ультрабыстрых процессов в нанотрубках (НТ) на основе дисульфида вольфрама  $WS_2$ , относящегося к классу дихалькогенидов переходных металлов.

Изучаемые образцы представляли из себя пленки из диспергированных в этаноле  $WS_2$ НТ, полученные методом вакуумной фильтрации [7] и нанесенные на подложку из  $z$ -среза кварца. Изучение морфологии исследуемых образцов проводилось посредством пропускающей и сканирующей электронных микроскопий. Статистика нанотрубок показала, что средний диаметр нанотрубок составил 94 нм, в то время как их длина порядка 1 мкм. Кроме того, снимки позволяют утверждать, что массив нанотрубок не имеет выделенных направлений, а сами нанотрубки являются многостенными.

В наших ранних работах была проведена широкополосная спектроскопия  $WS_2$ НТ, показавшая экситонные пики поглощения на 670, 560 и 500 нм (видимый диапазон) и малый отклик свободных носителей заряда в терагерцевой области [8]. В той же работе мы показали, что рамановские моды исследуемых пленок при длине лазера  $\lambda = 532$  нм, соответствующие продольным ( $E_{2g}^1$ ) и поперечным ( $A_{1g}$ ) фононным колебаниям, наблюдались на частотах 417 и 351  $cm^{-1}$  соответственно.

Текущие исследования сосредоточились на исследовании образцов методом оптической накачки — терагерцевого (ТГц) зондирования и спектроскопии нестационарного поглощения. Мы обнаружили, что несмотря на малую проводимость в ТГц-диапазоне,  $WS_2$ НТ имеют в нем существенную фотопроводимость, живущую на масштабе десятков пикосекунд. Данные спектров фотопроводимости в ТГц-диапазоне позволили нам определить значение подвижности носителей заряда при разных мощностях: от 100 до 300  $cm/V \cdot s$  (диапазон мощностей накачки от 0 до 3  $мкДж/см^2$ ). Кроме этого, исследование динамики пропускания показало, что ключевыми процессами в ТГц-области являются захват зарядов на поверхностных состояниях и дефектах.

Динамика поглощения в видимой области вблизи экситонного резонанса показала линейную зависимость величины  $X(0)/X(t) - 1$  от времени задержки, где  $X(t)$  — плотность экситонов при задержке  $t$  (рис. 1). Это позволяет утверждать о наличии двумерной диффузии экситонов в одномерных  $WS_2$ НТ, что находится в согласии с теоретическими оценками радиуса Бора для экситона 1,8 нм и диаметра нанотрубки, оцененного из ПЭМ. Кроме того, в работе изучается применимость различных пределов транспорта зарядов (реакция–диффузия).

Таким образом, в нашей работе мы показали, что нанотрубки на основе дисульфида вольфрама обладают фотопроводимостью в ТГц диапазоне, что делает их потенциальными кандидатами для практических приложений в ТГц технологиях, а также установили на основе оптической накачки — терагерцевого (ТГц) зондирования и спектроскопии нестационарного поглощения фундаментальных ультрабыстрых процессы, происходящие в данном наноматериале.

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФИ № 21-79-10097.

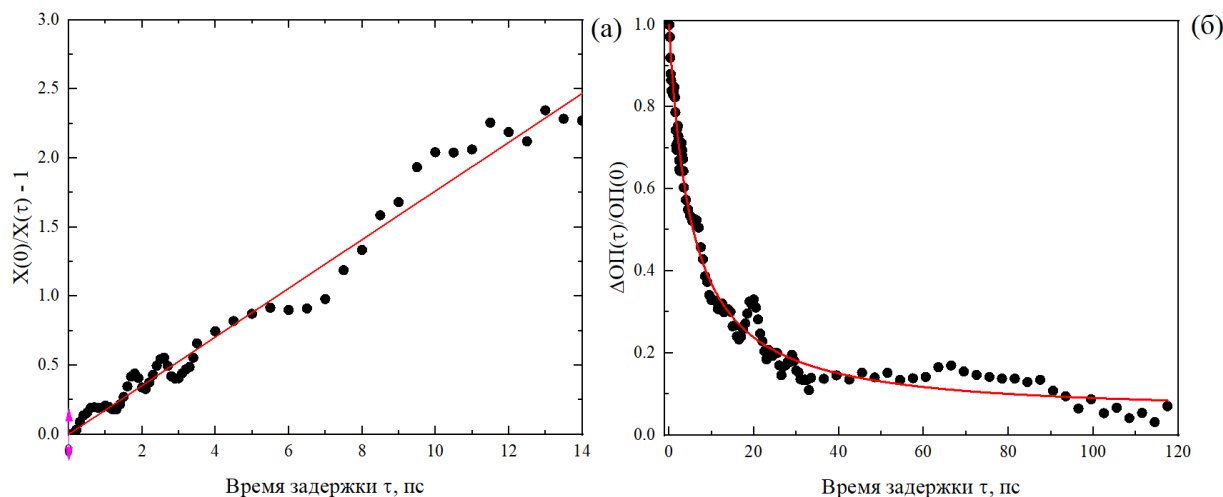


Рис. 1. Исследование пределов реакция-диффузия в  $WS_2NT$ : зависимость относительного приращения плотности экситонов от времени задержки (а) и относительная оптическая плотность от времени задержки (б). Черные точки — эксперимент, красные линии — аппроксимация

### Литература

1. Wang H., Wang H.S., Ma C. [et al.] Graphene nanoribbons for quantum electronics // Nat. Rev. Phys. 2021. V. 3. P. 791–802.
2. Paul K. K., Kim J. H., Lee Y. H. Hot carrier photovoltaics in van der Waals heterostructures // Nat. Rev. Phys. 2021. V. 3. P. 178–192.
3. Anirban A. Superconductivity in untwisted graphene // Nat. Rev. Phys. 2022. V. 4(1): 8.
4. Anirban A. Fuzzy graphene for neuron control // Nat. Rev. Phys. 2020. V. 2(7): 344.
5. Manzeli S., Ovchinnikov D., Pasquier D., Yazyev O. V., Kis A. 2D transition metal dichalcogenides // Nat. Rev. Mater. 2017. V. 2(8): 17033.
6. Joyce H., Boland J., Davies C., Baig S., Johnston M. B. A review of the electrical properties of semiconductor nanowires: insights gained from terahertz conductivity spectroscopy // Semicond. Sci. Technol. 2016. V. 31: 103003.
7. Nasibulin A. G., Moysala A., Brown D. P., Jiang H., Kauppinen E. I. A novel aerosol method for single walled carbon nanotube synthesis // Chem. Phys. Lett. 2005. V. 402(1–3). P. 227–232.
8. Пауков М. И., Гольдт А. Е., Командин Г. А., Сюй А. В., Насибулин А. Г., Бурданова М. Г. Оптические и терагерцевые свойства органических и неорганических нанотрубок // Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 29 ноября–03 декабря 2021 г. Фундаментальная и прикладная физика. P. 456–459.

УДК 538.935

### Межкраевой плазмон Берри: невзаимная настраиваемая плазменная мода в отсутствие магнитного поля

А. С. Петров

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Невзаимные устройства составляют важнейшую часть современной техники. Невзаимные явления могут проявляться только в системах с нарушенной лоренцевской взаимностью [1], что традиционно достигается использованием внешнего магнитного поля. Ожидаемо, что экстремальная и весьма желательная форма невзаимности, однонаправленный транспорт, долгое время была возможна только в экстремальных условиях: при квантующих магнитных полях и гелиевых температурах [2] (квантовый эффект Холла). В таких условиях электроны распространяются однонаправленно по краям двумерной электронной системы (2DES) за счет возникновения так называемых хиральных краевых состояний, обладающих уникальной направленностью и устойчивых к обратному рассеянию.

Интересно, что существует новый класс устройств, поддерживающих передачу сигнала с защитой от обратного рассеяния в широком диапазоне частот: фотонные топологические изоляторы (ФТИ) [3]. ФТИ представляет собой специально спроектированную метаструктуру, обладающую ненулевым потоком Берри различной природы [4]. По сути, конечная кривизна Берри лежит в основе невзаимности ФТИ и устраняет необходимость во внешнем магнитном поле. Более того, ФТИ обладают другими



преимуществами, такими как работа при комнатной температуре или совместимость с CMOS, и, таким образом, они предлагают прекрасную платформу для обработки сигналов на кристалле.

Тем не менее системы из конденсированного состояния имеют сильное преимущество перед метаструктурами: они легко настраиваются. Действительно, ФТИ приобретают свои свойства еще на этапе изготовления и далее работают «как есть». Напротив, системы с конденсированными средами и особенно 2DES выигрывают от многочисленных методов управления: эффект поля, внешнее освещение, нагрев и т. д.

В этой работе мы объединяем преимущества обоих подходов. А именно, мы предлагаем схему перестраиваемой передачи терагерцевого сигнала, невосприимчивого к обратному рассеянию, без магнитного поля. С этой целью мы предсказываем новую однонаправленную плазмонную моду, которая связана между 2DES с разной кривизной Берри. При заданной кривизне Берри частота моды лежит в ограниченном окне в терагерцевом диапазоне, а точное расположение окна зависит от контраста плотности несущих в соседних 2DES. Настраивая контраст плотности (например, напряжением на затворе или внешним освещением), можно управлять частотным окном плазмона и направлением его распространения. Этот факт открывает новые возможности для перестраиваемых однонаправленных ТГц передатчиков.

По материалам исследования выпущена публикация [5].

Автор благодарен Д. Свинцову за внимательное руководство и поддержку. Работа выполнена при поддержке стипендии Президента РФ, проект № СП-429.2021.5.

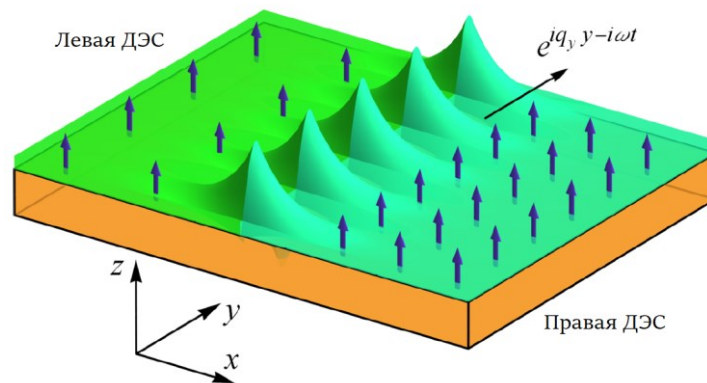


Рис. 1. Схематичное изображение межкраевого плазмона Берри, локализованного на контакте двух ДЭС с различными потоками Берри. Зеленая и сине-зеленая области обозначают различные ДЭС, оранжевая область — субстрат, плотность стрелочек обозначает относительную величину потока Берри

### Литература

1. *Dirk J.* [et al.]. What is — and what is not — an optical isolator // *Nat. Photonics*. 2013. V. 7(8). P. 579–582.
2. *Klitzing K. V., Dorda G., Pepper M.* New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance // *Phys. Rev. Lett.* 1980. V. 45(6). P. 494–497.
3. *Khanikaev A. B.* [et al.]. Photonic topological insulators // *Nat. Mater.* 2013. V. 12(3). P. 233–239.
4. *Ozawa T.* [et al.]. Topological photonics // *Rev. Mod. Phys.* 2019. V. 91(1):015006.
5. *Petrov A. S.* Plasmonic excitation for a tunable transmitter without magnetic field immune to backscattering // *Phys. Rev. B*. 2021. V. 104: L241407.

УДК 544.22.022.384.3

### Изучение одиночных дефектов в гексагональном нитриде бора

**Е. А. Примак<sup>1,2</sup>, П. Г. Вилюзанина<sup>3</sup>, С. В. Большедворский<sup>2</sup>, В. В. Сошенко<sup>2</sup>, А. В. Акимов<sup>2,4</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>3</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

<sup>4</sup>Международный центр квантовой оптики и квантовых технологий

Квантовые источники излучения лежат в основе многих технологий будущего, таких как квантовая коммуникация, квантовая память и квантовые сенсоры. В качестве источников такого излучения могут служить квантовые точки или дислокации в различных материалах. В качестве однофотонных источни-

ков чаще всего применяются квантовые точки, выращенные эпитаксией [1]. В качестве сенсоров и квантовой памяти широко применяются различные центры в алмазе [2, 3]. В частности, центр окраски азот-вакансия привлекает большой интерес из-за наличия у него так называемого оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР) [4], позволяющего определять состояние спина по свечению центра.

Оптически детектируемый магнитный резонанс заметного контраста является редким явлением, поэтому продолжается поиск альтернативных алмазу материалов, также обладающих дефектами с оптически детектируемым магнитным резонансом. Одними из таких центров является семейство дефектов кристаллической решетки в гексагональном нитриде бора (h-BN).

Долгое время h-BN использовался в качестве подложки для графена ввиду своей схожей структуры и устойчивости к внешним воздействиям. В статье 2016 г. были продемонстрированы дислокации в h-BN, которые при комнатной температуре давали поляризованное яркое однофотонное излучение [5]. Эти результаты повлекли за собой дальнейшие исследования и привлекли большой интерес научного сообщества. В последнее время h-BN зарекомендовал себя как многообещающий материал, в котором при помощи таких методов, как облучения импульсным лазером; облучения ионными, нейтронными, электронными пучками; отжиг в печи, можно создать различные дефекты, обладающие уникальными свойствами при комнатной температуре: сравнительно большой яркостью и широким спектральным диапазоном [6–8]. Эти дефекты также могут применяться в качестве однофотонных источников [9, 10].

Гексагональный нитрид бора представляет собой слоистый материал с гексагональной структурой, как правило, слои чередуются в порядке АВВВ [11]. Являясь диэлектриком, h-BN имеет запрещенную зону шириной 6 эВ. Расстояние между двумя одинаковыми слоями составляет около 6,6 Å, а расстояние между атомами бора и азота составляет 1,5 Å. Эти параметры очень чувствительны к внешним условиям: температуре, давлению, внешним магнитным полям, что делает h-BN хорошим сенсором [11]. Электронная плотность в узлах сильно локализована в плоскости одного слоя, из-за чего свойства дефектов в слоистом h-BN очень схожи со свойствами дефектов в монослое [12].

В своей работе мы изучали образцы h-BN, которые подготавливала группа А. Ю. Кунцевича [13]. В итоге были изучены два класса чешуек h-BN: полученные методом *tape exfoliation* из купленного кристалла h-BN (HQ-Graphene) и полученные из порошка нитрида бора. При помощи конфокального микроскопа [3] нами было изучено свыше 100 чешуек h-BN, где успешно были найдены дефекты, квантовые свойства которых требуют дальнейшего изучения.

В ходе работы было установлено, что образцы h-BN, полученные из порошка нитрида бора, содержат более устойчивые к внешним воздействиям дефекты, остающиеся активными на протяжении всего эксперимента. Однако такие дефекты встречаются крайне редко, нами было найдено и изучено лишь 2 дефекта. В это же время дефекты в образцах, полученных из кристаллического нитрида бора, встречаются намного чаще, но имеют свойство деградировать как во времени, так и при воздействии лазера конфокального микроскопа, а потому требуют более аккуратного обращения.

В итоге мы нашли множество одиночных дефектов в h-BN (рис. 1), и в данный момент мы приступили к изучению ОДМР этих дефектов, а также к изучению их спектров люминесценции. Эти измерения помогут нам глубже понять природу и характер найденных центров и отобрать необходимые для дальнейшего изучения и применения в технологии.

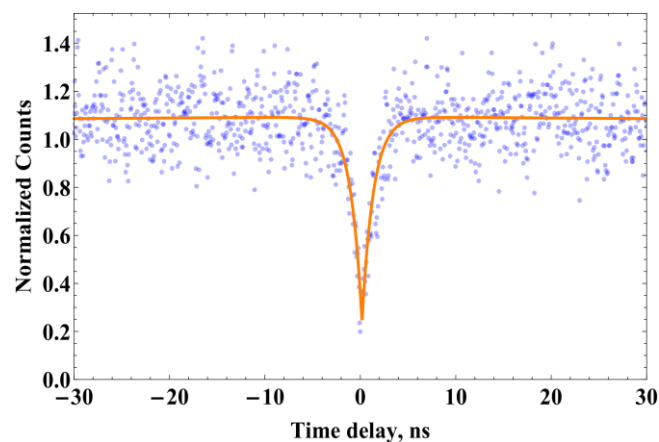


Рис. 1. Функция корреляции второго порядка  $g_2 \approx 0,24$  на дислокации в порошковом нитриде бора при комнатной температуре. Время жизни дефекта составило  $\tau \approx 2,3$  нс

## Литература

1. Galimov A. I. [et al.]. Source of indistinguishable single photons based on epitaxial InAs/GaAs quantum dots for integration in quantum computing schemes // JETP Lett. 2021. V. 113(4). P. 252–258.
2. Bolshedvorskii S. V. [et al.]. Single silicon vacancy centers in 10 nm diamonds for quantum information applications // ACS Appl. Nano Mater. 2019. V. 2(8). P. 4765–4772.
3. Vorobyov V. [et al.]. Superconducting detector for visible and near-infrared quantum emitters // Opt. Mater. Express. 2016. V. 7(2). P. 513–526. DOI: 10.1364/OME.7.000513.
4. Soshenko V. [et al.]. Microwave antenna for exciting optically detected magnetic resonance in diamond NV centers // Bulletin of the Lebedev Physics Institute. 2018. V. 45. P. 237–240.
5. Tran T., Bray K., Ford M. [et al.]. Quantum emission from hexagonal boron nitride monolayers // Nat. Nanotechnol. 2016. V. 11. P. 37–41.
6. Hou S. [et al.]. Localized emission from laser-irradiated defects in two-dimensional hexagonal boron nitride // 2D Materials. 2017. V. 5(1): 015010. DOI: 10.1088/2053-1583/aa8e61.
7. Tran T. T. [et al.]. Robust multicolor single photon emission from point defects in hexagonal boron nitride // ACS Nano. 2016. V. 10(8). P. 7331–7338.
8. Xingyu G. [et al.]. Femtosecond laser writing of spin defects in hexagonal boron nitride // ACS Photonics. 2021. V. 8(4). P. 994–1000.
9. Liu W., Ivády V., Li ZP. [et al.]. Coherent dynamics of multi-spin  $V_B^-$  center in hexagonal boron nitride // Nat. Commun. 2022. V. 13: 5713.
10. Koehl W. F. [et al.]. Room temperature coherent control of defect spin qubits in silicon carbide // Nature. 2021. V. 479(7371). P. 84–87.
11. Gottscholl A., Diez M., Soltamov V. [et al.]. Spin defects in hBN as promising temperature, pressure and magnetic field quantum sensors // Nat. Commun. 2021. V. 12: 4480.
12. Ivády V., Barcza G., Thiering G. [et al.]. Ab initio theory of the negatively charged boron vacancy qubit in hexagonal boron nitride // npj Comput. Mater. 2020. V. 6: 41.
13. Gritsienko A. V. [et al.]. Photodynamics of bright subnanosecond emission from pure single-photon sources in hexagonal boron nitride // Nanomaterials (Basel). 2022. V. 12(24): 4495.

УДК 537.874, 537.876

## Плазмон-поляритоны в метакристаллах из сфероидальных нанорезонаторов

*Е. Ю. Рябков, И. С. Харичкин, Д. Г. Баранов*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Изучение режимов взаимодействия между различными колебаниями материалов и электромагнитными волнами является одним из важнейших аспектов в исследовании поляритонов [1–3], развитии квантовых и лазерных технологий, а также контроле свойств материалов [4] и химических реакций [5–9]. Для наблюдения собственных стационарных состояний связанной системы требуется достижение сильной связи между веществом и оптическим полем, что в общем случае реализуется лишь при использовании различных квантовых эмиттеров в экзотических условиях, таких как высокий вакуум, низкие температуры или сильные магнитные поля. Однако особые оптические эффекты возможно наблюдать и в нормальных условиях при использовании композиций из плазмонных нанорезонаторов [10, 11].

В рамках данного исследования мы рассматриваем взаимодействие метакристаллов из сфероидальных плазмонных наночастиц со свободным оптическим полем в вакууме. Нам удалось построить гамильтонову модель и с ее помощью изучить поведение и особенности дипольного момента перехода, поляритонного расщепления, добротности и константы связи в данных системах. В соответствии с результатами была составлена общая картина взаимодействия света с плазмонными нанорезонаторами в зависимости от их геометрии, а также были установлены универсальные пределы силы связи, которые демонстрируют теоретическую возможность достижения глубокой сильной связи (DSC) в отсутствие экстремальных условий.

## Литература

1. Khitrova G., Gibbs H., Kira M., Koch S.W., Scherer A. Vacuum Rabi splitting in semiconductors // Nat. Phys. 2006. V. 2. P. 81–90.
2. T'ormá P., Barnes W.L. Strong coupling between surface plasmon polaritons and emitters: a review // Rep. Prog. Phys. 2014. V. 78: 013901.

3. *Baranov D. G., Wersäll M., Cuadra J., Antosiewicz T. J., Shegai T.* Novel nanostructures and materials for strong light-matter interactions // *ACS Photonics*. 2018. V. 5(1). P. 24–42.
4. *Ebbesen T. W.* Acc. Chem. Res. 2016. V. 49, P. 2403–2412.
5. *Thomas A.* [et al.]. Ground-state chemical reactivity under vibrational coupling to the vacuum electromagnetic field // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016. V. 55(38). P. 11462–11466.
6. *Munkhbat B.* [et al.]. Suppression of photo-oxidation of organic chromophores by strong coupling to plasmonic nanoantennas // *Sci. Adv.* 2018. V. 4(7): eaas9552.
7. *Thomas A.* [et al.]. Tilting a ground-state reactivity landscape by vibrational strong coupling // *Science* 2019. V. 363. P. 615–619.
8. *Peters V. N.* [et al.]. Effect of strong coupling on photodegradation of the semiconducting polymer P3HT // *Optica*. 2019. V. 6(3). P. 318–325.
9. *Stranius K., Hertzog M., Börjesson K.* Broadband highly directive 3D nanophotonic lenses // *Nat. Commun.* V. 9(1): 4742.
10. *Ameling R., Giessen H.* Cavity plasmonics: large normal mode splitting of electric and magnetic particle plasmons induced by a photonic microcavity // *Nano Lett.* 2010. V. 10(11). P. 4394–4398.
11. *Bisht A.* [et al.]. Collective strong light-matter coupling in hierarchical microcavity-plasmon-exciton systems // *Nano Lett.* V. 19(1). P. 189–196.

УДК 535.016

### **Точки топологической фазовой сингулярности в дисульфиде молибдена**

*М. Н. Сидорова*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Явления сингулярности фазы находят широкое применение в разных сферах науки и техники, например, методы цифровой голографии позволяют путем сохранения и восстановления амплитуды и фазы воспроизводить полную информацию об исходном оптическом поле. Также сингулярности фазы находят большой отклик в биосенсорике. Использование эффекта фазовой сингулярности в биосенсорах без меток позволяет улучшить их чувствительность [1], открывается возможность для развития недорогих и сверхчувствительных приборов, которые могут быть основаны на плазмонных, полупроводниковых или диэлектрических материалах. Чувствительность таких приборов определяется углом пересечения дисперсионной кривой материала и поверхностью нулевого отражения, получающейся в результате приравнивания к нулю коэффициента отражения Френеля [2]. В данной работе была рассмотрена структура  $\text{MoS}_2/\text{SiO}_2(280\text{ нм})/\text{Si}$  при различных толщинах  $t$  слоя дисульфида молибдена (в диапазоне 100–1200 нм), было зафиксировано изменение положения топологических в пространстве параметров (угол падения, длина волны падающего света). Также было проанализировано это положение при наличии поверхностных зарядов [3].

### **Литература**

1. *Tselikov G.* [et al.]. Topological Darkness: How to Design a Metamaterial for Optical Biosensing with Virtually Unlimited Sensitivity // arXiv preprint. [2023]. arXiv:2302.02022.
2. *Ermolaev G.* [et al.]. Topological phase singularities in atomically thin high-refractive-index materials // *Nat. Commun.* 2022. V. 13: 2049.
3. *Álvarez-Pérez G.*, [et al.]. Analytical approximations for the dispersion of electromagnetic modes in slabs of biaxial crystals // *Phys. Rev. B*. 2019. V. 100: 235408.

# Секция сверхпроводимости, низких температур и квантовых материалов

Председатель: В. М. Пудалов (д. ф.-м. н., член-корреспондент РАН)

Зам. председателя: Т. Е. Кузьмичева (к. ф.-м. н.)

Секретарь: А. Э. Борисов

Дата: 06.04.2023

Время: 10:00

УДК 538.945

## Изучение сверхпроводящих свойств $\text{Na}(\text{Fe},\text{Co})\text{As}$

*И. В. Жувагин*

Высшая школа экономики (национальный исследовательский университет)

Класс 111 является наименее изученным из известных классов железосодержащих сверхпроводников. Наличие щелочного металла, бурно реагирующего с парами воды, усложняет изучение таких соединений. В данной работе исследуются сверхпроводящие свойства монокристалла  $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$  с двумя уровнями допирования: недодопированный и передопированный. Используя четырехточечный метод измерения сопротивления с синхронным детектированием при приложенном магнитном поле, получены зависимости удельного сопротивления от температуры (рис. 1). Магнитное поле было направлено в плоскости  $ab$  и вдоль направления с величиной от 0 до 16 Тл. В результате приведены оценки верхнего критического поля  $H_{c2}$  при помощи однозонной модели WHN и двузонной модели Гуревича, получена температурная зависимость показателя анизотропии.

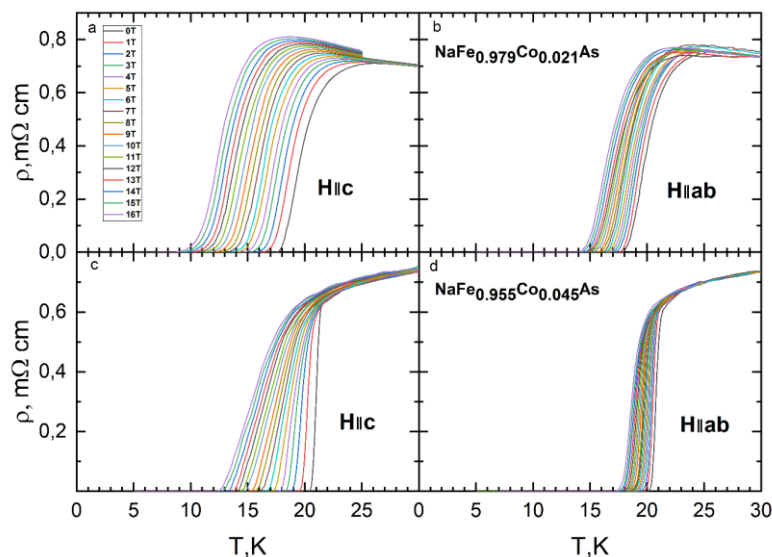


Рис. 1. Температурная зависимость удельного сопротивления в различных ориентациях магнитного поля

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22-72-10082.

### Литература

1. Кузьмичева Т. Е., Кузьмичев С. А. Пниктиды семейства  $\text{AFEAS}$  ( $A = \text{Li}, \text{Na}$ ) на основе щелочных металлов: современное состояние исследований электронных и сверхпроводящих свойств (миниобзор) // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 114. Вып. 10. С. 685–698.

2. Ghannadzadeh S. [et al.]. Upper Critical Field of  $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$  superconductors // Phys. Rev. B. 2014. V. 89(5): 054502.
3. Wang A. F. [et al]. Pressure effects on the superconducting properties of single-crystalline co doped nafeas // New J. Phys. 2012. V. 14(11): 113043.

УДК 538.945

## Универсальность и выделенные состояния спектров многотерминальных SNS-контактов

А. Ф. Посадский<sup>1,2</sup>, А. Г. Семенов<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Физический институт РАН им. П. Н. Лебедева

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

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 (SNS) контакты с большим числом ( $M > 2$ ) терминалов, созданные на основе нормальных металлов, полупроводников и сверхпроводников (рис. 1).

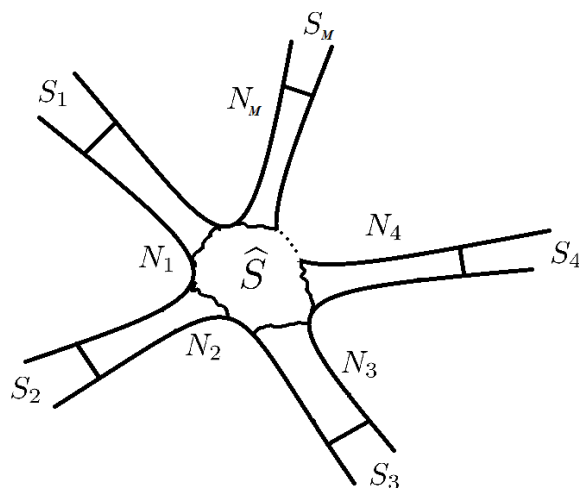


Рис. 1. Схематическое изображение  $M$ -терминального джозефсоновского контакта

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.

В данной работе рассматривается многотерминальный джозефсоновский контакт (МДК) с произвольным числом терминалов  $M$ , в центре которого находится примесь, описываемая некоторой матрицей рассеяния  $\hat{S}$ . Частный случай трехтерминального контакта был рассмотрен в работе [5]. Показано, что в определенных приближениях спектры андреевских состояний таких структур определяются только вероятностями туннелирования  $T_{i,j}$  между терминалами и не зависят от диагональных фаз матрицы рассеяния. Данный факт означает, что спектры МДК обладают некоторой универсальностью: они не меняются при любом изменении фаз отражения от примеси. Этим они отличаются от спектров соответствующих нормальных контактов, где зависимость от фаз, накапливаемых при отражении, не исчезает.

Помимо прочего обнаружено, что при равных длинах терминалов в случае нечетного числа  $M$  появляется поднабор состояний, не зависящих от разностей фаз сверхпроводников и свойств рассеяния на примеси. В случае четного  $M$  такие состояния отсутствуют.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю к. ф.-м. н. Андрею Георгиевичу Семенову за помощь в координации работы, дельные советы и обсуждения данной задачи, а также всем, кто сколько-нибудь помогал в процессе.

## Литература

1. *Josephson B. D.* Possible new effects in superconductive tunnelling // *Phys. Lett.* 1962. V. 1(7). P. 251–253.
2. *Де Жен П.* Сверхпроводимость металлов и сплавов. — М.: Мир, 1968.
3. *Chang L.-F., Bagwell P. F.* Ballistic Josephson-current flow through an asymmetric superconductor–normal-metal–superconductor junction // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 49: 15853–15863.
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. 12573–12586.
5. *Xie H.-Y., Vavilov M. G., Levchenko A.* Topological Andreev bands in three-terminal Josephson junctions // *Phys. Rev. B.* 2017. V. 96(16): 161406.

УДК 538.915

### Методика Pump-probe с лазерной накачкой и электрическим зондированием

*М. И. Блуменау<sup>1</sup>, Е. В. Таркаева<sup>1</sup>, А. Ю. Кунцевич<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Методика Pump-probe является одной из наиболее простых для изучения быстрой электронной динамики. Традиционно используется очень короткий лазерный импульс (десятки фемтосекунд), который разделяется на две неравные части. Более мощный луч (Pump) используется для возбуждения образца и создания неравновесного состояния. Более слабый (probe) проходит через регулируемую линию задержки, после чего попадает на образец. Измеряя коэффициент прохождения или отражения в зависимости от времени задержки, возможно получить информацию о релаксации образца. Недавно были реализованы различные модификации данной методики, в том числе времяразрешенный ARPES [1] и электрический Pump-probe [2].

В данной работе реализован вариант методики с лазерным импульсом накачки и электрическим зондированием. Накачка осуществляется при помощи пикосекундной лазерной системы. Зондирование производится коротким (от 1 до 50 нс) импульсом прямоугольной формы амплитуды меньше 1 В, получаемым при помощи генератора, синхронизированного с лазером. Образец располагается в оптическом криостате в атмосфере гелия. Отработанная методика позволяет изучать релаксацию сопротивления образцов на масштабах от наносекунд до микросекунд. Метод был опробован для исследования релаксации скрытого состояния в 1T-TaS<sub>2</sub>.

## Литература

1. *Zhou X.* [et al.]. New developments in laser-based photoemission spectroscopy and its scientific applications: a key issues review // *Rep. Prog. Phys.* 2018. V. 81(6): 062101.
2. *Dirisaglik F.* [et al.]. High speed, high temperature electrical characterization of phase change materials: metastable phases, crystallization dynamics, and resistance drift. *Nanoscale*, (2015). 7 (40)

УДК 538.945

### Наблюдение бозонной моды методом SnS-андреевской спектроскопии в соединении (K,Na)Fe<sub>2</sub>Se<sub>2</sub>

*В. М. Михайлов<sup>1,2</sup>, С. А. Кузьмичев<sup>3,1</sup>, А. Д. Ильина<sup>1,2</sup>, И. А. Никитченко<sup>3</sup>, И. В. Морозов<sup>3</sup>,  
А. И. Болталин<sup>3</sup>, А. И. Шилов<sup>3,1</sup>, Т. Е. Кузьмичева<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Для железосодержащих сверхпроводников в рамках модели спаривания на спиновых флуктуациях, подразумевающей  $s_{\pm}$ -волновую симметрию сверхпроводящего параметра порядка предсказывается наличие пика мнимой части магнитной восприимчивости на векторе нестинга с энергией, меньшей  $2\Delta_L$ . Экспериментально данный пик наблюдался на спектре неупругого рассеяния нейтронов для различных

железосодержащих сверхпроводников [1]. Согласно теории [2], в диффузионных туннельных контактах испускание спиновых экситонов в процессе многократных андреевских отражений будет вызывать появление особенностей-спутников минимумов субгармонической структуры (СГС) большей щели на напряжениях смещения:

$$eV_B = \frac{2\Delta_L + \varepsilon_0}{n}, \text{ где } n \text{ — натуральное число.}$$

В данной работе исследованы спектры дифференциальной проводимости туннельных контактов, полученных методикой «break-junction» в монокристаллах  $(\text{K,Na})\text{Fe}_2\text{Se}_2$ . На рассмотренных спектрах дифференциальной проводимости наблюдался резкий пик проводимости при нулевом напряжении смещения, что вместе с характерным избыточным током на вольт-амперной характеристике свидетельствует о высокой прозрачности полученных туннельных контактов. Кроме того, на спектрах дифференциальной проводимости были определены субгармонические структуры с числом минимумов порядка числа Кнудсена  $l/d < 3$ , а нормальная проводимость полученных контактов, в строгом подчинении формуле Шарвина, оказалась не зависящей от температуры. Исходя из вышесказанного следует, что полученные контакты являлись баллистическими, близкими к диффузионному режиму.

По положениям резких минимумов субгармонических структур на спектрах был определен сверхпроводящий параметр порядка  $\Delta_L = 5,3 \pm 0,3$  мэВ. На малой выборке спектров также наблюдалась отдельная резкая субгармоническая структура, от (предположительно) малой сверхпроводящей щели  $\Delta_S \sim 1,2$  мэВ. Смещенный на напряжение, соответствующее энергии  $\varepsilon_0 = 6,4$  мэВ, вправо относительно особенности  $2\Delta_L$  экспериментально наблюдался размытый минимум, связанный, предположительно, с испусканием бозонной спин-флуктуационной моды. Кроме основного бозонного спутника, более слабый минимум наблюдается также на напряжении смещения  $\sim 2\Delta_L + 2\varepsilon_0$ , что может соответствовать испусканию двух бозонов в процессе многократных андреевских отражений.

Положения и температурные зависимости бозонных спутников совпадают для туннельных контактов, полученных на различных экспериментальных образцах. При этом энергия бозонной моды  $\varepsilon_0$  при гелиевой температуре оказывается очень близкой к предположительной  $\Delta_L + \Delta_S$ . С увеличением температуры энергия бозона медленно уменьшается, в согласии с [3], а соответствующие ей особенности-спутники различимы почти до  $T_C$ . Аналогичную температурную зависимость имеет и второй бозонный резонанс на смещении  $\sim 2\Delta_L + 2\varepsilon_0$ .

Таким образом, наблюдаемая бозонная мода существует только в сверхпроводящем состоянии, а ее энергия почти не зависит от геометрии контакта. Соответственно, согласно [3], наблюдаемый бозон может являться спиновым экситоном.

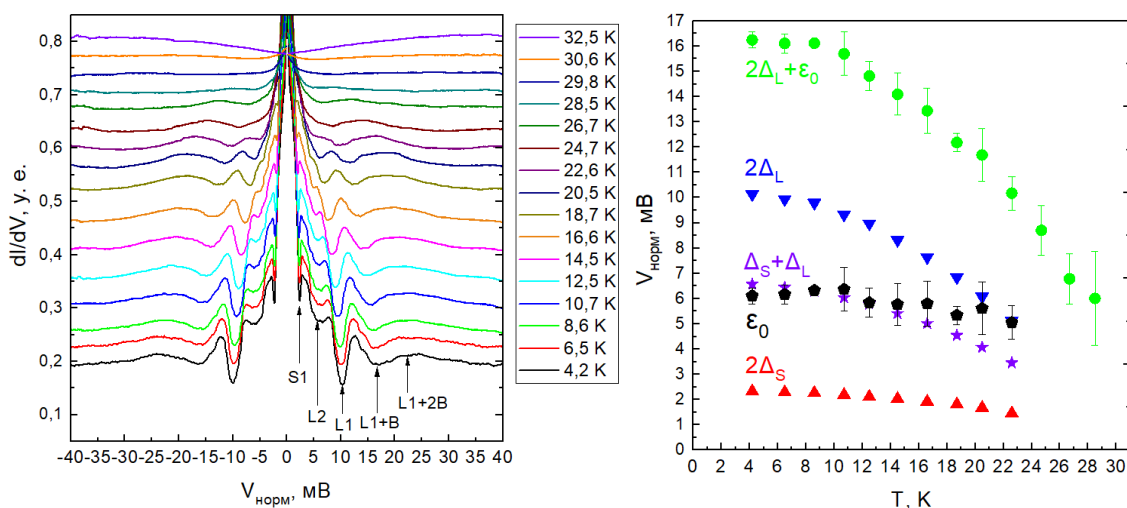


Рис. 1. Температурная эволюция спектра дифференциальной проводимости, на которой наблюдаются резкие главные минимумы СГС малой и большей щели, а также размытые минимумы-спутники, связанные с испусканием спиновых экситонов (а); температурные зависимости положений первых минимумов СГС большой и малой щели и их полусуммы в сравнении с вычисленной энергией бозонного резонанса (б)

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. Inosov D. S. [et al.]. Normal-state spin dynamics and temperature-dependent spin-resonance energy in optimally doped  $\text{BaFe}_{1.85}\text{Co}_{0.15}\text{As}_2$  // Nat. Phys. 2010. V. 6. P. 178–181.
2. Korshunov M. M. [et al.]. Direct observation of the spin exciton in Andreev spectroscopy of iron-based superconductors // Materials. 2022. V. 15(17): 6120.
3. Korshunov M. M. [et al.]. Spin resonance peak in Fe-based superconductors with unequal gaps // Phys. Rev. B. 2016. V. 94: 094517.

УДК 537.9

### Туннельная спектроскопия пниктидов $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$ с вариацией степени допирования в нормальном состоянии

*И. А. Никитченков<sup>1</sup>, С. А. Кузьмичев<sup>2,1</sup>, К. С. Перваков<sup>2</sup>, В. А. Власенко<sup>2</sup>, А. Д. Ильина<sup>1,3</sup>,  
В. М. Михайлов<sup>1,3</sup>, Т. Е. Кузьмичева<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>3</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Соединения  $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$  имеют слоистую кристаллическую структуру, в которой сверхпроводящие (СП) блоки  $\text{FeAs}$  чередуются в  $c$ -направлении с плоскостями  $\text{Ba}$ . В стехиометрическом составе это соединение имеет дальний антиферромагнитный порядок. При электронном допировании антиферромагнетизм постепенно подавляется и возникает сверхпроводящая фаза, образующая «колокол», с максимальной критической температурой  $T_c \approx 21$  К [1]. На поверхности Ферми присутствуют дырочные зоны около  $\Gamma$ -точки зоны Бриллюэна и электронные цилиндры около  $M$ -точки; последние часто рассматривают как единую эффективную электронную зону. Ожидается, что при температурах ниже  $T_c$  на электронных листах поверхности Ферми образуется несколько сверхпроводящих конденсатов.

Мы исследовали монокристаллы  $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$  недо- и передопированных составов с  $x=0,06; 0,08, 0,12$  и  $0,14$  и соответствующими  $T_c \approx 14$  К, 18 К, 16 К и 13 К. В образцах при  $T=4,2$  К с помощью техники «break-junction» [2] создавались контакты на микротрещине типа сверхпроводник–барьер–сверхпроводник (ScS). По нашим оценкам, полученные контакты находились в полубаллистическом режиме: отношение характерной длины неупругого рассеяния к размеру контакта составляло в  $c$ -направлении  $l/d \approx 1 \div 3$ . Целью работы было исследование особенностей вольтамперных характеристик (ВАХ) контактов и спектров динамической проводимости  $dI(V)/dV$  в сверхпроводящем и нормальном состоянии.

Ниже  $T_c$  наблюдался эффект некогерентных многократных андреевских отражений (IMARE), вызывающий избыточный ток при любых смещениях  $eV$ , а также появление повышенной андреевской проводимости при нулевом смещении и щелевых минимумов при любых температурах вплоть до  $T_c$  [3]. При этом ВАХ и  $dI(V)/dV$  демонстрировали сильную нелинейность как в сверхпроводящем, так и в нормальном состоянии (ниже  $T_c$  на фоне этой нелинейности присутствовали андреевские особенности). Таким образом, данная нелинейность не связана со сверхпроводящими свойствами и вызвана особенностями нормального состояния. Форма нелинейности  $dI(V)/dV$  схожа с «псевдощелью», наблюдаемой в высокотемпературных купратах.

При малых смещениях  $dI(V)/dV$  выше  $T_c$  имеет минимум. При  $eV \approx 12 \div 13$  мэВ на спектрах наблюдался максимум, а при  $eV \approx 20 \div 28$  мэВ — минимум. Форма особенностей схожа при различной степени электронного допирования и  $T_c$  и воспроизводится для всех исследованных контактов. Нормальное сопротивление контактов при  $eV \gg 2\Delta(0)$  практически не менялось с увеличением температуры, следовательно, данную нелинейность нельзя объяснить перегревом контактной области при протекании измерительного тока. Нами показано, что с увеличением температуры выше  $T_c$  до 40–50 К форма нелинейности сохраняется: положения максимумов и минимумов  $dI(V)/dV$  в нормальном состоянии практически не зависят от температуры. Эффект воспроизводится для контактов, полученных в различных монокристаллах, не зависит от нормального сопротивления контакта, его площади и прозрачности туннельного барьера, таким образом, нелинейность  $dI(V)/dV$  в нормальном состоянии является внутренним свойством  $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$  и не может быть объяснена случайными эффектами или размерными резонансами.

Известно, что спектр туннельного NcN-контакта (N — нормальный металл) определяется распределением плотности электронных состояний  $N(E)$  вблизи уровня Ферми [4]. Таким образом, можно

предположить нелинейное распределение  $N(E)$  вблизи  $E_F$ , вызванное особенностями зонной структуры  $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$ . С другой стороны, можно предположить перенормировку  $N(E)$  в нормальном состоянии вследствие резонансного электрон-бозонного взаимодействия [5]. Тем не менее, как отмечалось в работе [6], подобный эффект достаточно слабо проявляется в эксперименте, так как соответствующие особенности заметны только на второй производной ВАХ; хотя мы не исключаем реализацию второго сценария, проявление особенностей зонной структуры на туннельных спектрах кажется более вероятной причиной наблюдаемой нелинейности  $dI(V)/dV$ .

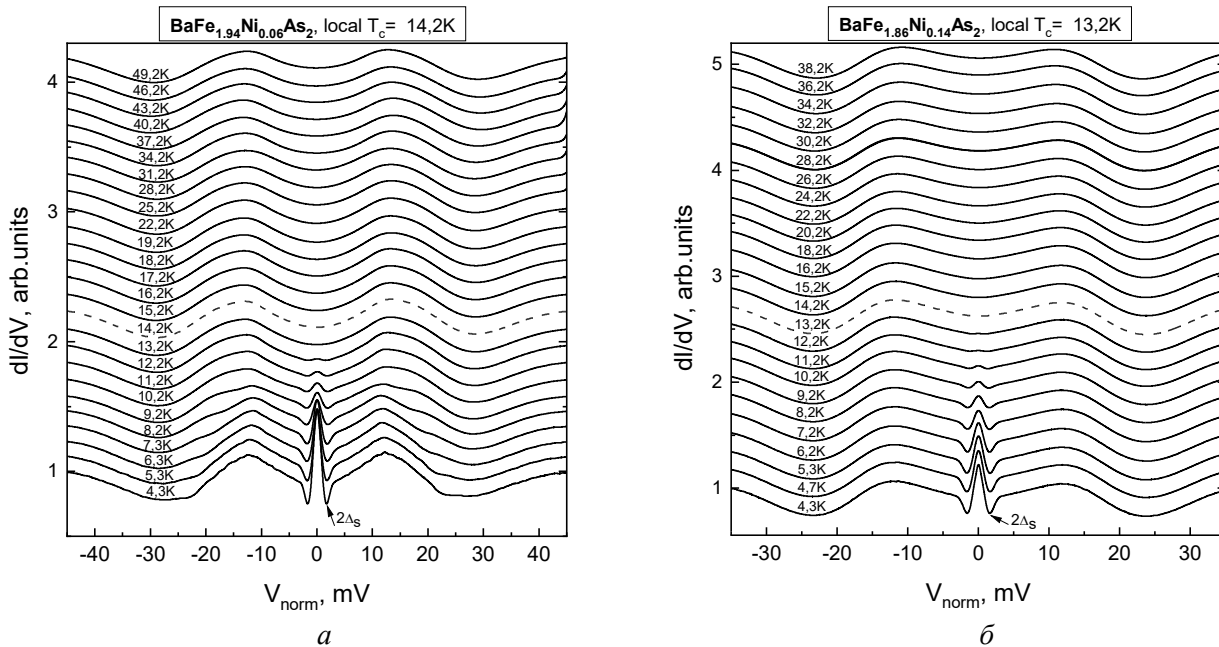


Рис. 1. Спектр динамической проводимости контакта в образцах  $\text{BaFe}_{1.94}\text{Ni}_{0.06}\text{As}_2$  (а) и  $\text{BaFe}_{1.86}\text{Ni}_{0.14}\text{As}_2$  (б), измеренные при различных температурах. Спектры сдвинуты вдоль вертикальной оси для наглядности. Локальные критические температуры контактов  $T_c = 14,2$  К и  $13,2$  К, соответственно. Андреевский минимум при  $4,3$  К отмечен стрелкой

### Литература

1. Lu X. Phase diagram and magnetic excitations of  $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ : A neutron scattering study. Springer Theses. — Singapore: Springer, 2017.
2. Кузьмичев С. А., Кузьмичева Т. Е. Техника “break-junction” применительно к слоистым сверхпроводникам // Физика низких температур. 2016. Т. 42. № 11. С. 1284–1310.
3. Kuetemmel R. [et al.]. Andreev scattering of quasiparticle wave packets and current-voltage characteristics of superconducting weak links // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 3992–4009.
4. Giaever I., Megerle K. Study of superconductors by electron tunneling // Phys. Rev. 1961. V. 112. P. 1101–1111.
5. Свиштунов В. М., Белоголовский М. А., Черняк О. И. Туннельные исследования металлов в области высоких давлений // УФН. 1987. Т. 151. С. 31–66.
6. Бобров Н. Л. Спектроскопия электрон-фононного взаимодействия сверхпроводящих микроконтактов: экспериментальные аспекты // УФН 2020. Т. 190. С. 1143–1163.

УДК 538.945

### Электронные свойства кристалла $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , интеркалированного атомами Cu

М. А. Наумов<sup>1</sup>, А. Ю. Кунцевич<sup>2</sup>, Ю. Г. Селиванов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

$\text{Bi}_2\text{Se}_3$  — хорошо изученный трехмерный топологический изолятор с большой шириной запрещенной зоны ( $\approx 0,3$  эВ). Материал имеет слоистую структуру со слабым ван-дер-ваальсовым межслойным взаимодействием. При помощи включения металла между слоями можно повлиять на спектр поверхност-

ных состояний в  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . Оказалось, что при допировании атомами Cu, Sr, Nb материал становится сверхпроводником 2-го рода и демонстрирует нематичность сверхпроводимости [1]. Есть указания, что сверхпроводимость в допированном  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  проявляет топологические свойства.

В данной работе была реализована интеркаляция медью кристалла  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  с помощью электрохимической интеркаляции в водном растворе 0,1 М  $\text{CuSO}_4$ . Для этого поддерживался постоянный потенциал 105–110 мВ относительно насыщенного хлорсеребряного электрода сравнения в трехэлектродной электрохимической ячейке в течение 5–15 дней. В связи с окислением в воздушной атмосфере, для части образцов процесс происходил в азотном перчаточном боксе. После интеркаляции образцы запаивались в кварцевую ампулу, заполненную аргоном, далее проводился отжиг в течение двух часов при температуре 560°C с дальнейшей закалкой [2].

Были получены образцы  $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$  с содержанием меди  $x \approx 0,04–0,3$  согласно кулонометрическим данным. Проведены исследования их состава и структуры методами XPS, EDS, LEED. Из данных XPS (рис. 1) следует, что медь находится в состояниях  $\text{Cu}^0$  и (или)  $\text{Cu}^{+1}$ . На рис. 2 изображен EDS образца  $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . Содержание меди соответствует  $x \approx 0,15$ . Также с помощью EDS была проверена равномерность распределения меди по плоскости скола. Медь не повреждает решетку  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , что следует из данных дифракции электронов (метод LEED).

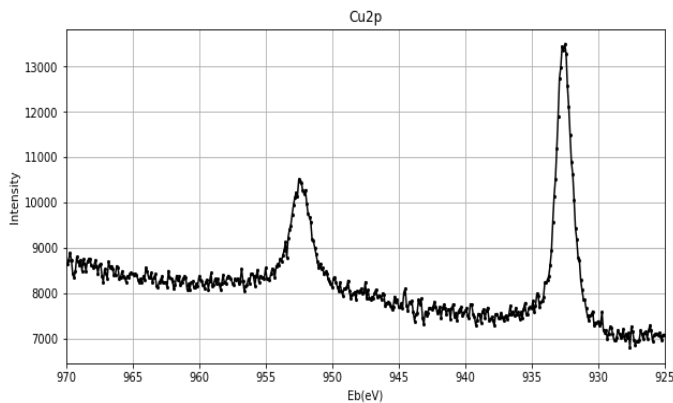


Рис. 1. Данные XPS Cu 2p образца  $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$

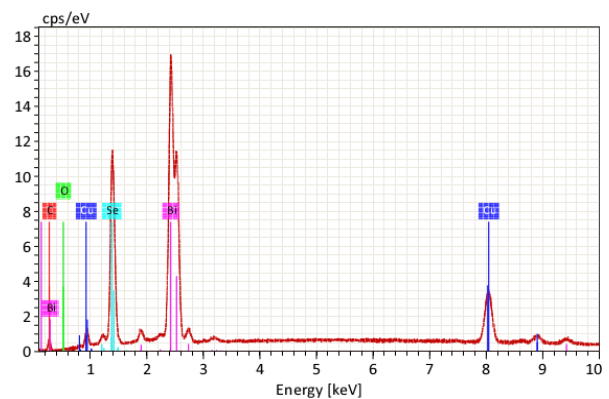


Рис. 2 Данные EDS образца  $\text{Cu}_{0,15}\text{Bi}_2\text{Se}_3$

Образцы  $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$  были исследованы с помощью метода ARPES (рис. 3). Было показано, что топологические состояния с линейным законом дисперсии сохраняются после интеркаляции. Уровень Ферми в материале  $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$  смещается вверх из-за увеличения концентрации электронов при добавлении меди [3].

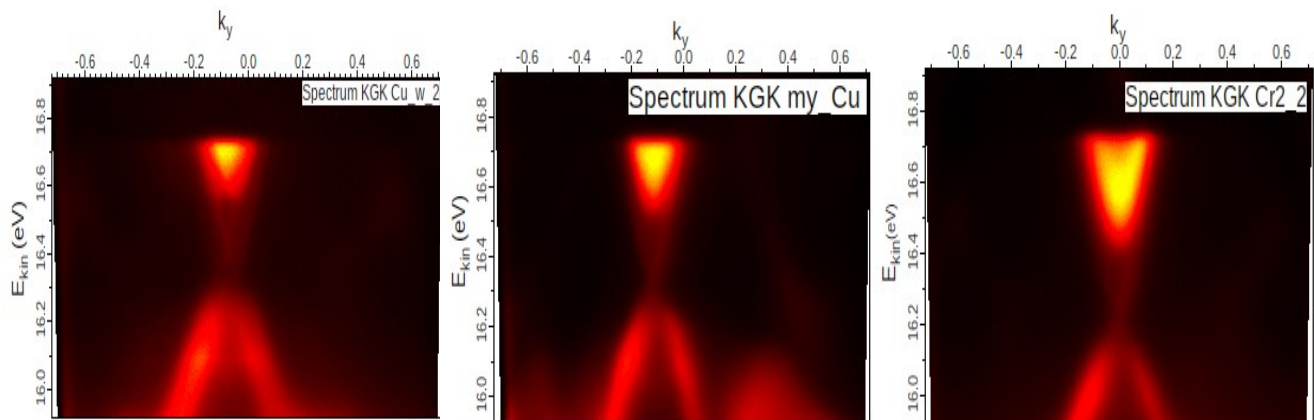


Рис. 3. Данные ARPES для образцов  $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$  с различным содержанием меди. Атомный процент содержания меди увеличивается слева направо

Образцы были исследованы с помощью транспортных измерений в холловской конфигурации при гелиевых температурах. Обнаружено увеличение концентрации и уменьшение подвижности при интеркаляции Cu в решетку  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . Достигнуты значения концентраций  $n \approx 10^{20} \frac{1}{\text{cm}^3}$ , характерные для сверхпроводящих образцов. Были получены температурные и полевые зависимости сопротивлений, которые говорят о наличии сверхпроводящей фазы при температуре ниже 3 К, что соответствует литературным данным [2].

## Литература

1. Yonezawa S. Nematic Superconductivity in Doped  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  Topological Superconductors // *Condens. Matter*. 2019. V. 4(1): 2.
2. Kriener M. [et al.]. Electrochemical synthesis and superconducting phase diagram of  $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$  // *Phys. Rev. B*. V. 84: 054513.
3. Lahoud E. [et al.]. Evolution of the Fermi surface of a doped topological insulator with carrier concentration // *Phys. Rev. B*. V. 88: 195107.

УДК 533.233

### Зависимость контактных углов графенового покрытия от профиля материала под ним

И. А. Бетке<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Новосибирский национальный исследовательский государственный университет

<sup>2</sup>Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН

В научной среде нет единого мнения о том, как графен (моноатомный слой  $sp^2$ -гибридизованных атомов углерода) изменяет смачиваемость гидрофильных и гидрофобных материалов. Так как использование графена перспективно во многих областях, разрешение данного вопроса может привести к важным открытиям в микроканальной физике или поможет решить одну из важных задач современной гидродинамики — созданию поверхности с регулируемым значением контактного угла.

Цель работы — устранить противоречия, расширив представления о свойствах графена и его влиянии на различные поверхности и исследовать возможность консервации свойств материала, деградирующих на атмосфере, графеновым покрытием.

В работе исследовано влияние графенового покрытия на смачиваемость гладких и текстурированных поверхностей с супергидрофильными и супергидрофобными свойствами. Образцы графена были синтезированы методом атмосферного ХОГФ на медной подложке. В качестве атомарно гладких образцов использовались пластины монокристаллического кремния, покрытые оксидной пленкой различной толщины. Текстурированные супергидрофильные и супергидрофобные поверхности на основе кремния и меди были получены методом лазерной абляции.

Показано, что на всех образцах графен уменьшал как гидрофильные, так и гидрофобные свойства, устремляя значение контактного угла к собственному углу смачивания графита. При этом в сравнении с атомарно гладкими поверхностями, на текстурированных образцах влияние графена усиливалось. Особое внимание уделялось деградирующим образцам, которые вследствие осаждения из воздуха функциональных С–С и С–Н групп за время эксперимента изменяли свойства от супергидрофильных до супергидрофобных. Покрытие таких образцов графеном приводило к стабилизации нейтрального значения контактного угла около  $90^\circ$ . Показано, что поверхности медных подложек с графеновым покрытием, подвергшиеся длительной экспозиции на воздухе, после удаления графена все равно возвращались в гидрофильное состояние.

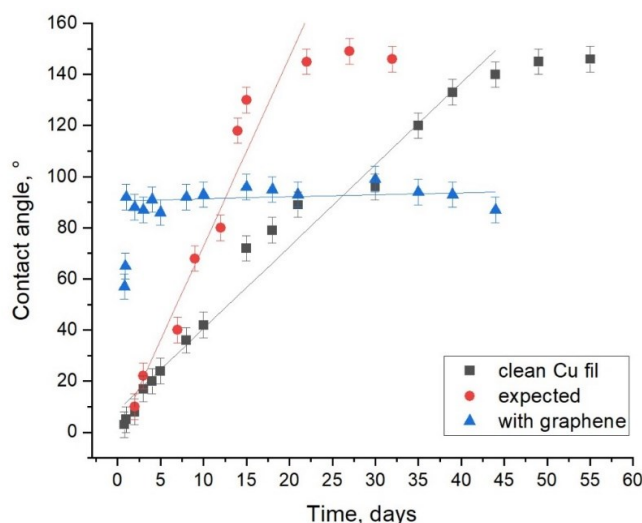


Рис. 1. Измеренные значения контактных углов для эволюционирующих образцов с графеновым покрытием и без него. Скачок гидрофобности после синтеза связан с абсорбцией графеном паров воды

В результате работы подтверждена гипотеза о существенной роли характера прилегания графена к поверхности на модификацию ее свойств, исследованы явления стабилизации и консервации свойств подложки при нанесении графеновой пленки.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ-23-29-00260.

### Литература

1. *Starinskiy S. V.* [et al.]. Formation of periodic superhydrophilic microstructures by infrared nanosecond laser processing of single-crystal silicon // *Appl. Surf. Sci.* 2020. V. 512: 145753.
2. *Misyura S. Y.* [et al.]. Experimental data and modeling of wettability on graphene-coated copper // *Mat. Sci. Eng. B.* 2021. V. 277(7): 115588.

УДК: 538.9

## Спектроскопия многократных андреевских отражений сверхпроводящего селенида (K,Na)Fe<sub>2</sub>Se<sub>2</sub>

*А. Д. Ильина<sup>1,2</sup>, С. А. Кузьмичев<sup>3,1</sup>, В. М. Михайлов<sup>1,2</sup>, И. А. Никитченко<sup>3</sup>, И. В. Морозов<sup>3</sup>,  
А. И. Шилов<sup>3,1</sup>, Т. Е. Кузьмичева<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Соединение (K,Na)Fe<sub>2</sub>Se<sub>2</sub> переходит в сверхпроводящее (СП) состояние при критической температуре  $T_c = 31$  К. В отличие от других сверхпроводящих пниктидов железа, это соединение полностью немагнитно, а также нестабильно в присутствии паров воды. Монокристаллы (K,Na)Fe<sub>2</sub>Se<sub>2</sub> обладают естественным фазовым расслоением: в них сосуществуют как минимум три фазы (СП, металлическая и антиферромагнитная); СП фаза растет преимущественно на границах металлических кластеров и ее объемная доля в среднем составляет 10–15% [3]. (K,Na)Fe<sub>2</sub>Se<sub>2</sub> имеет слоистую структуру, состоящую из блоков FeSe, интеркалированных в с-направлении плоскостями щелочного металла. На поверхности Ферми отсутствуют дырочные зоны около Г-точки зоны Бриллюэна, при этом присутствуют вложенные электронные цилиндры около М-точки; последние часто рассматривают как единую эффективную электронную зону. Ожидается, что при температурах ниже  $T_c$  на электронных листах поверхности Ферми образуется единственный СП конденсат.

В исследованных монокристаллах (K,Na)Fe<sub>2</sub>Se<sub>2</sub> при  $T = 4,2$  К создавались контакты на микротрещине (техника «break-junction» [1]) типа сверхпроводник–нормальный металл–сверхпроводник (SnS). В таких контактах при условии их баллистичности (толщина нормального металла меньше длины свободного пробега квазичастиц) наблюдался эффект многократных некогерентных андреевских отражений IMARE. Эффект вызывает избыточный андреевский ток  $I_{exc}^A$  на вольт-амперной характеристике (ВАХ) SnS-контакта при любых смещениях  $eV$ , а также появление повышенной андреевской проводимости при нулевом смещении ( $ZBC^A$ ) и серии минимумов динамической проводимости  $dI(V)/dV$  — субгармонической щелевой структуры (СГС), расположенных на смещениях  $eV = 2\Delta/n$  ( $\Delta$  — амплитуда СП щели,  $n$  — натуральное число) при любых температурах вплоть до  $T_c$  [4]. Как показали расчеты [2], температурная зависимость избыточного андреевского тока  $I_{exc}^A(T) \sim \Delta(T)$ , а  $ZBC^A(T) \sim \tanh[\Delta(T)/(2k_B T)]$ . Целью нашей работы было определение количества и величин СП щелей в (K,Na)Fe<sub>2</sub>Se<sub>2</sub> методами спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений (IMARE), а также исследование температурного поведения особенностей, вызванных андреевским транспортом,  $I_{exc}^A(T)$  и  $ZBC^A(T)$ .

В результате эксперимента в наших контактах наблюдался эффект IMARE и характерная для него СГС на спектрах дифференциальной проводимости  $dI/dV$  при  $T \ll T_c$  вплоть до  $n = 4$  минимумов.  $ZBC^A$  составила  $1,4 \div 8,2 G_N$ , где  $G_N$  — нормальная проводимость контакта. По количеству наблюдаемых особенностей оценили порядок величины отношения  $l/d$  в с-направлении, получили  $l/d \approx 1 \div 4$ . По положениям минимумов на спектрах дифференциальной проводимости определили  $\Delta_0 \approx 5,4 \pm 0,3$  мэВ при  $T = 0$  К. Характеристическое отношение тогда составляет  $2\Delta_0/k_B T_c = 3,98$ , что превышает БКШ-предел слабой связи и говорит о сильном электрон-бозонном взаимодействии в селениде. Чтобы исследовать особенности, вызванные IMARE, мы построили температурные

зависимости  $I_{\text{exc}}^A(T)$  и  $ZBC^A(T)$  и аппроксимировали их однозонной БКШ-образной моделью [2]. В качестве  $\Delta(T)$  была взята однозонная БКШ-образная функция  $\Delta(T) = \Delta_0 \cdot \sqrt{1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^b}$  (f), где  $b$  — подбираемый в нашей задаче параметр (для предела слабой связи теории БКШ  $b_{\text{BCS}} = 3,016$ ),  $\Delta_0$  — взяли из эксперимента. Получилось, что данные  $I_{\text{exc}}^A(T)$  могут быть описаны БКШ-образной кривой, но при этом зависимость  $ZBC^A(T)$  проходит немного ниже соответствующей теоретической функции и может быть описана в рамках [2] функцией со степенью  $2 < 3,016$ . Таким образом, получили, что  $\Delta_0$ , подошедшая для аппроксимации экспериментальной температурной зависимости  $I_{\text{exc}}^A(T)$ , согласуется с  $\Delta_0$ , определенной нами ранее из положений СГС. Эта согласованность параметра порядка еще раз доказала наличие минимумов, связанных именно с IMARE и ничем другим. Отметим, что небольшое понижение экспериментальной зависимости  $ZBC^A(T)$  может быть вызвано пониженной плотностью электронных состояний вблизи уровня Ферми или рассеянием электронов в процессе IMARE.

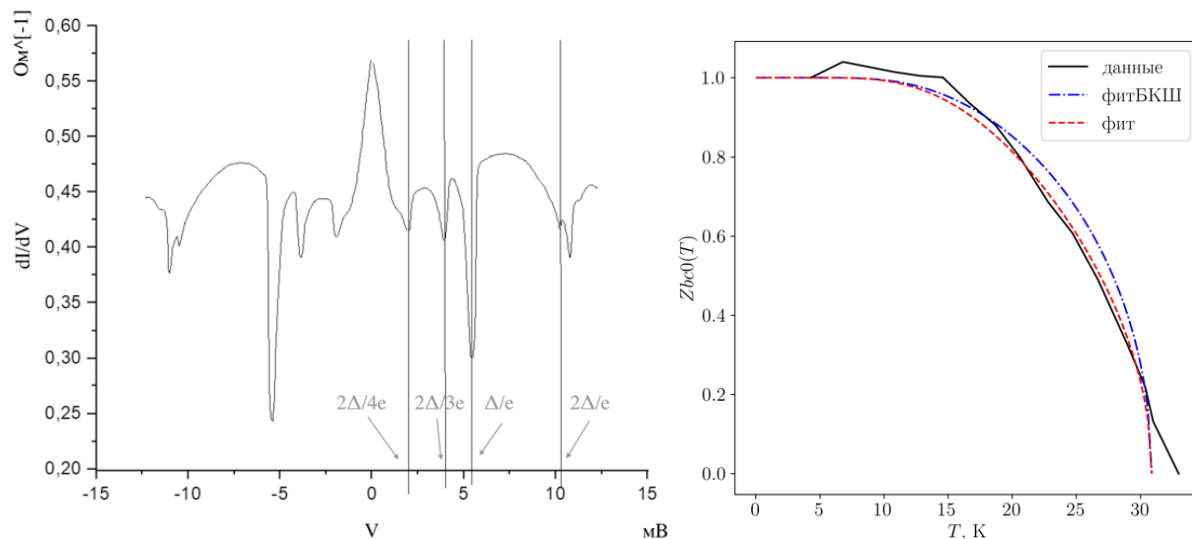


Рис. 1. Спектр дифференциальной проводимости андреевского контакта, измеренный при температуре 4,2 К. Андреевские минимумы, отмеченные стрелками, образуют СГС до  $n=4$ , определенная из нее  $\Delta_0 \approx 5,4 \pm 0,3$  мэВ (a); сплошная линия — температурная экспериментальная зависимость  $Zbc0(T)$ , штриховая — ее аппроксимация пропорционально формуле (f); штрих-пунктирная — формулой в приближении слабой связи БКШ (б)

### Литература

1. Кузьмичев С. А., Кузьмичева Т. Е. Техника «break-junction» применительно к слоистым сверхпроводникам // Физика низких температур. 2016. Т. 42. № 11. С. 1284–1310.
2. Gunsenheimer U., Zaikin A. D. Ballistic charge transport in superconducting weak links // Phys. Rev. B. 1994. V. 50. P. 6317.
3. Krzton-Maziopa A. Intercalated iron chalcogenides: phase separation phenomena and superconducting properties // Front. Chem. 2021. V. 9: 640361. DOI: 10.3389/fchem.2021.640361
4. Kuemmel R. Andreev scattering of quasiparticle wave packets and current-voltage characteristics of superconducting metallic weak links // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 3992–4009.

---

# Секция алгебраической геометрии и математической физики

---

Председатель: А. А. Белавин (д. ф.-м. н., член-корреспондент РАН)

Зам. председателя: И. В. Каржеманов

Секретарь: И. В. Данилин

---

Дата: 05.04.2023

Время: 10:00

УДК 530.145

## Неупругие эффекты теории поля Изинга в чисто мнимом магнитном поле

*Д. Д. Менской*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)  
Институт проблем передачи информации им. А. А. Харкевича РАН

Решеточная модель Изинга описывает фазовый переход парамагнетик–ферромагнетик. В двумерии ее скейлинговый предел описывается теорией поля Изинга, которая в критической точке является теорией безмассовых майорановских фермионов. Согласно теореме Янга–Ли, нули статистической суммы ферромагнитного случая модели Изинга лежат на единичной окружности в комплексной плоскости параметра  $z = e^{-2H/T}$ , где  $H$  — внешнее магнитное поле, а  $T$  — температура системы, т. е. соответствуют мнимому магнитному полю. Плотность этих нулей в высокотемпературном режиме, т. е. при температуре выше критической температуры  $T > T_c$ , является критическим показателем, описываемым теорией поля Янга–Ли. Евклидово действие данной теории имеет вид

$$\mathcal{A}_{LY} = \mathcal{A}_{\mathcal{M}_{2,5}} + ih \int d^2x \varphi(x),$$

где  $\mathcal{A}_{\mathcal{M}_{2,5}}$  — действие минимальной модели  $\mathcal{M}_{2,5}$ ,  $\varphi$  — единственное ее примарное поле, а  $h = H - iH_0(T)$  ( $H_0(T)$  — точки ветвления намагниченности  $M(H, T)$ ). Спектр данной теории состоит из массивных частиц одного сорта. Теория является интегрируемой, а ее факторизованная матрица рассеяния частиц характеризуется амплитудой рассеяния

$$S(\theta) = \frac{\sinh \theta + i \sin \frac{\pi}{3}}{\sinh \theta - i \sin \frac{\pi}{3}}.$$

В данной работе предлагается изучить инфракрасный предел теории поля Янга–Ли. Эффективное действие таких теорий можно написать в виде

$$\mathcal{A}_{JR} = \mathcal{A}_{\mathcal{M}_{2,5}} + ih \int d^2x \varphi(x) + \sum_i \alpha_i \int d^2x O_i(x),$$

где  $O_i$  и  $\alpha_i$  — иррелевантные операторы и соответствующие им константы связи. Иррелевантным оператором наименьшей размерности является оператор  $T\bar{T}$ , добавление которого в действие не нарушает интегрируемость исходной теории. Следующим по размерности иррелевантным оператором, дающим не тривиальный вклад, является поле  $\Xi = L_{-4}\bar{L}_{-4}$  (здесь  $L_{-4}$  и  $\bar{L}_{-4}$  соответственно генераторы голоморфной и антиголоморфной алгебр Вирасоро), бесспиновый потомок поля  $\varphi$ . В работе вычисляется пятиточечный формфактор данного оператора в теории поля Янга–Ли

$$F_5^\Xi(\theta_1, \dots, \theta_5) = \frac{4m^8}{ih\pi\beta^2(1-\Delta)} H_5 \sigma_5 (\sigma_2 \sigma_3 - \sigma_5) \prod_{i < j} \frac{f(\theta_i - \theta_j)}{e^{\theta_i} + e^{\theta_j}} \sum_{i,j=1}^5 e^{5(\theta_i - \theta_j)},$$

где  $\theta_i$  — быстроты частиц,  $m$  — масса частиц в квантовой теории поля Янга–Ли,  $\beta = -\frac{14}{19}$ ,  $\Delta = -\frac{1}{5}$  — размерность поля  $\varphi$ ,  $f(\theta)$  — минимальный двухчастичный формфактор, который вычисляется по формуле

$$f(\theta) = \frac{\cosh \theta - 1}{\cosh \theta + 1/2} v(i\pi - \theta)v(-i\pi + \theta)$$

с  $v(\theta) = \prod_{n=1}^{\infty} \left[ \frac{(\theta/2i\pi + n + \frac{1}{2})(\theta/2i\pi + n - \frac{1}{6})(\theta/2i\pi + n - \frac{1}{3})}{(\theta/2i\pi + n - \frac{1}{2})(\theta/2i\pi + n + \frac{1}{6})(\theta/2i\pi + n + \frac{1}{3})} \right]^n$ ,  $H_5 = -\frac{\pi m^2}{4\sqrt{3}} \left( \frac{3^{1/4}}{2^{1/2}v(0)} \right)^5$ , а  $\sigma_2, \sigma_3$  и  $\sigma_5$  — симметрические многочлены 2, 3 и 5 порядков соответственно, которые определяются соотношением

$$\prod_{i=1}^n (x + x_i) = \sum_{k=0}^n x^{n-k} \sigma_k(x_1, \dots, x_n).$$

Тот факт, что данный формфактор ненулевой, свидетельствует о возникновении процессов рассеяния с рождением частиц, а следовательно, и о нарушении интегрируемости. В работе вычисляется зависимость сечения неупругого процесса рассеяния  $2 \rightarrow 3$  от энергии центра масс двух налетающих частиц  $E = 2m \cosh \frac{\theta_1 - \theta_2}{2}$

$$\sigma_{2 \rightarrow 3}(\theta_1, \theta_2) = \frac{g^2}{3!} \int \frac{d\beta_1}{2\pi} \frac{d\beta_2}{2\pi} \frac{d\beta_3}{2\pi} (2\pi)^2 \delta^{(2)}(P_{\text{out}} - P_{\text{in}}) |\langle \beta_1, \beta_2, \beta_3 | \Xi(0) | \theta_1, \theta_2 \rangle|^2,$$

где

$$\langle \beta_1, \beta_2, \beta_3 | \Xi(0) | \theta_1, \theta_2 \rangle = F_5^{\Xi}(\beta_1, \beta_2, \beta_3, \theta_1 + i\pi, \theta_2 + i\pi).$$

Получены высокоэнергетическая асимптотическая зависимость

$$\sigma_{2 \rightarrow 3}(E) = E^{\alpha}, \quad \alpha = 14,371188422418763,$$

а также асимптотика над порогом рождения

$$\sigma_{2 \rightarrow 3}(E) = (E - 3m)^3.$$

### Литература

1. *Zamolodchikov A. B.* Two-point correlation function in scaling Lee–Yang model // Nucl. Phys. B. 1991. V. 348. P. 619–641.
2. *Zamolodchikov A., Ziyatdinov I.* Inelastic scattering and elastic amplitude in Ising field theory in a weak magnetic field at  $T > T_c$ . Perturbative analysis // Nucl. Phys. B. 2011. V. 849. P. 654–674.

УДК 515.16, 530.22

### Гипотеза Джонса на косах ширины 4

*Д. В. Корзун<sup>1</sup>, А. В. Слепцов<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>Институт проблем передачи информации им. А. А. Харкевича

В 1985 г. В. Джонс открыл очень сильный полиномиальный инвариант узла, за что позднее был удостоен Филдсовской премии. Почти сразу стало ясно, что он не различает все узлы, т. е. не является полным инвариантом. Однако ответа на базовый вопрос, различает ли полином Джонса тривиальный узел, нет до сих пор — это и есть знаменитая задача Джонса. Было множество попыток решить ее и в начале 2000-х гг. С. Бигелов [1] смог связать проблему Джонса и проблему точности представления Бурау для группы кос на 4 нитях  $B_4$ . Оказалось, что для групп кос на 4 нитях представления Бурау и Темперли–Либа [2] одновременно точны или одновременно неточны. Утверждается, если представление Темперли–Либа окажется неточным, то существует способ построения нетривиального узла с тривиальным полиномом Джонса. Поэтому осмысленно исследовать узлы на 4 нитях.



В работе нами были рассмотрены отдельные частные случаи. Нами была исследована возможность существования узла с тривиальным полиномом Джонса  $J(K)$  и нетривиальным полиномом ХОМФЛИ  $H(K)$ . Для случая не более 4 нитей мы показали, что не существует таких узлов, чтобы у них были тривиальные полиномы Джонса и Александра  $A_1(K)$  и нетривиальный полином ХОМФЛИ одновременно. Если же не требовать тривиальность полинома Александра, то из неравенства Мортон–Франка–Уильямса [3] на ширину полинома ХОМФЛИ получается, что у таких потенциальных многочленов будет конкретный вид, образующий семейство возможных полиномов ХОМФЛИ. Для этого семейства была получена общая формула, которая запрещает некоторые классы узлов для рассматриваемого случая. Для потенциальных узлов, которые имеют такие полиномы, мы можем найти алгебраическую сумму пересечений и ограничение на род узла снизу, для всех таких узлов род будет не меньше 3.

Из условия на совпадение первых трех инвариантов Васильева у тривиального и искомого узлов для случая  $J(K) = 1$  и  $H(K) \neq 1$ ,  $A_1(K) \neq 1$  нами получено, что у гипотетического узла существует представление в виде замыкания произведения двух кос  $p$  и  $b$  [4], где коса  $p$  принадлежит нижнему центральному ряду группы чистых кос  $p \in LCS_n(P_k)$ , а коса  $b$  является представлением тривиального узла в группе  $V_k$ , где  $k$  не менее 6. При этом замыканию этого произведения не запрещается иметь представление на группе кос с меньшим числом нитей, в том числе и 4 нитями.

Отдельно был рассмотрен класс узлов-мутантов на 4 нитях, поскольку среди узлов-мутантов существуют узлы с совпадающими полиномами Джонса. Некоторые случаи узлов-мутантов нам удалось запретить.

Результатом нашей работы являются некоторые ограничения на возможные узлы, которые гипотетически могут решить задачу Джонса.

### Литература

1. *Bigelow S.* Does the Jones polynomial detect the unknot? // *J. Knot Theory Ramif.* 2002. V. 11(4). С. 493–505.
2. *Jones V.* Hecke algebra representations of braid groups and link polynomials // *New developments in the theory of knots.* — Singapore: World Sci. Publishing Co., 1987. P. 20–73.
3. *Morton H. R.* Seifert circles and knot polynomials // *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* 1986. V. 99(1). P. 107–109.
4. *Stanford T.* Braid commutators and Vassiliev invariants // *Pac. J. Math.* 1996. V. 174(1). P. 269–276.

УДК 512.76

## К-стабильность трехмерных логарифмических многообразий Фано с неприводимой границей

*К. В. Квитко*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Понятие  $K$ -стабильности многообразий Фано и, в частности, логарифмических многообразий Фано тесно связано с существованием на них метрики Кэлера–Эйнштейна и представляет особый интерес в бирациональной геометрии.

Пусть  $X$  — гладкое проективное многообразие над  $\mathbb{C}$ ,  $\Delta = \sum_i d_i D_i$ ,  $0 \leq d_i \leq 1$ , — эффективный  $\mathbb{Q}$ -дивизор с простыми нормальными пересечениями. Пара  $(X, \Delta)$  называется логарифмическим многообразием Фано, если логарифмический аналог антиканонического класса  $-K_X - \Delta$  является обильным  $\mathbb{Q}$ -дивизором. В размерности 3 классификация таких пар с целой границей была сделана Х. Маедой в 1986 г. [5].  $K$ -стабильность трехмерных лог Фано пар с приводимой границей была изучена К. Логиновым в [4], однако аналогичный вопрос для пар с неприводимой границей остается открытым.

Согласно численному критерию Фуджиты–Ли [1–3], лог Фано пара  $(X, \Delta)$  является  $K$ -стабильной тогда и только тогда, когда  $\beta_{(X, \Delta)}(D) > 0$  для любого дивизора  $D$  на любой лог разрешении  $(X, \Delta)$ , где  $\beta_{(X, \Delta)}$  обозначает бета-инвариант и определяется следующим образом. Пусть  $f: Y \rightarrow X$  — бирациональный морфизм из нормального многообразия  $Y$ . Тогда между каноническим классом  $Y$  и лог каноническим классом  $(X, \Delta)$  существуют связь

$$K_Y \equiv_{\text{num}} f^*(K_X + \Delta) + \sum_i a_{(X, \Delta)}(E_i) \cdot E_i ,$$

где  $E_i$  — произвольные дивизоры на  $Y$ . Числа  $a_{(X,\Delta)}(E_i)$  и  $A_{(X,\Delta)}(E_i) = a_{(X,\Delta)}(E_i) + 1$  называются дискрепантностью и лог-дискрепантностью соответственно. Наконец, бета-инвариант для дивизора  $D \subset Y$  определяется как

$$\beta_{(X,\Delta)}(D) = A_{(X,\Delta)}(D) - \frac{1}{(-K_X - \Delta)^3} \int_0^\infty \text{vol}(f^*(-K_X - \Delta) - tD) dt$$

для функции объема

$$\text{vol}(D) = \limsup_{m \rightarrow \infty} \frac{\dim H^0(X, O_X(D)^{\otimes m})}{m^n/n!}.$$

При изучении  $K$ -стабильности трехмерных лог-Фано пар  $(X, a\Delta)$ ,  $0 < a < 1$ , с неприводимой границей главная трудность заключается в работе с бесконечными семействами, т. е. такими парами, где  $X$  является либо расслоением на квадратики, либо  $\mathbb{P}^1$ -расслоением над поверхностями дель Пеццо, либо  $\mathbb{P}^2$ -расслоением над  $\mathbb{P}^1$  или его раздутием в  $k$ ,  $1 \leq k \leq 7$ , общих точках. Используя критерий Фуджиты–Ли, можно показать, что каждое такое семейство обладает только конечным числом  $K$ -стабильных представителей. Значит, множество  $K$ -стабильных трехмерных логарифмических многообразий Фано ограничено.

### Литература

1. Blum H., Xu C. Uniqueness of  $K$ -polystable degenerations of Fano varieties // Ann. Math. 2019. V. 190(2). P. 609–656.
2. Fujita K. A valuative criterion for uniform  $K$ -stability of  $\mathbb{Q}$ -Fano varieties // J. für die Reine und Angew. Math. 2019. V. 2019(751). P. 309–338.
3. Li C.  $K$ -semistability is equivariant volume minimization // Duke Math. J. 2017. V. 166(16). P. 3147–3218.
4. Loginov K.  $K$ -polystability of 3-dimensional log Fano pairs of Maeda type // Int. J. Math. 2023. V. 34(1): 2250095.
5. Maeda H. Classification of logarithmic Fano threefolds // Compos. Math. 1986. V. 57(1). P. 81–125.

УДК 530.1

## Спектр собственных значений большой действительной антисимметричной случайной матрицы

А. Коцевич<sup>1,2</sup>, П. А. Мещеряков<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН

В нашей работе была рассмотрена задача поиска спектра собственных значений случайной действительной антисимметричной матрицы  $J_{ij} = -J_{ji}$  большого размера  $N \gg 1$  (считаем  $N$  четным). Большое количество классических результатов теории случайных матриц представлены в [1]. Спектр собственных значений антисимметричной матрицы с нулевым средним уже был исследован в [2]. Мы рассматриваем случай ненулевого среднего при помощи метода реплик. Аналогичный подход для симметричных матриц применялся в [3, 4], для эрмитовых матриц — в [5].

Собственные значения матрицы  $J$  разбиваются по парам  $\pm i\lambda_i$ ,  $i \in \{1, \dots, N\}$ . Плотность распределения собственных значений в этом случае

$$\nu(\lambda) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N/2} (\delta(\lambda - \lambda_i) + \delta(\lambda + \lambda_i)). \quad (1)$$

Элементы матрицы берутся из распределения Гаусса с ненулевым средним  $\frac{J_0}{N}$  и дисперсией  $\sigma = \frac{J^2}{N}$ .

$$p(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(J_{ij} - \frac{J_0}{N})^2}. \quad (2)$$

После применения формулы Племяля–Сохоцкого получается

$$\nu(\lambda) = \frac{1}{\pi N} \text{Im} \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln \det(\mathbf{I}\lambda_\epsilon - i\mathbf{J}), \quad (3)$$

где  $\lambda_\epsilon = \lambda - i\epsilon$ .

Для решения задачи применяется метод реплик, который заключается в представлении логарифма в виде предела

$$\ln x = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{x^n - 1}{n}, \quad (4)$$

где в процессе всех вычислений  $n$  считается натуральным, а в самом конце переходим к пределу. Метод реплик позволяет свести задачу с ненулевым средним к уже решенной с нулевым средним.

Используя формализм фермионов, переписываем определитель в виде интегрирования по грассмановым переменным и получаем выражение

$$v(\lambda) = \frac{1}{\pi N} \operatorname{Im} \frac{\partial}{\partial \lambda} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left( \int \prod_{i;\alpha} d\bar{c}_i^\alpha d c_i^\alpha e^{-\sum_{i,j} \bar{c}_i^\alpha (\Omega_{\epsilon-i})_{ij} c_j^\alpha - 1} \right), \quad (5)$$

с которым производится многомерный аналог преобразования Хаббарда–Стратоновича

$$\exp\left(-\frac{a}{2}x^2\right) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left(-\frac{y^2}{2a} - icy\right), \quad (6)$$

где  $a > 0$ .

В случае нулевого среднего значения матричного элемента мы воспроизвели известный результат: получили Вигнеровский полукруг

$$\rho_0(\lambda) = \begin{cases} \frac{\sqrt{4J^2 - \lambda^2}}{2\pi J^2}, & |\lambda| < 2J; \\ 0, & |\lambda| > 2J. \end{cases} \quad (7)$$

В случае матриц с ненулевым средним мы получили новый результат:

$$\rho_{J_0}(\lambda) = \rho_0(\lambda) + \frac{1}{N} \sum_k \delta(\lambda - \mu_k) + \delta(\lambda + \mu_k), k \in \{j: \lambda_j^* > J\}, \quad (8)$$

где  $\lambda_k^* = \frac{J_0}{N} \lambda_k$  и  $\mu_k = \lambda_k^* + \frac{J^2}{\lambda_k^*}$ .

Численное моделирование подтверждает нашу формулу (см. рис. 1).

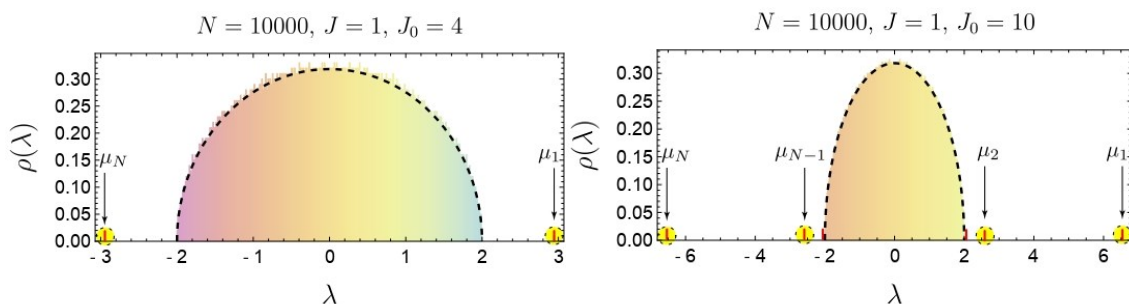


Рис. 1. Спектр собственных значений действительной антисимметричной случайной матрицы.  $N$  — размер матрицы,  $\sigma = \frac{J^2}{N}$  — дисперсия,  $\frac{J_0}{N}$  — среднее значение элементов матрицы

### Литература

1. Mehta M. L. Random matrices. — New York: Elsevier, 2004.
2. Mehta M. L., Rosenzweig N. Distribution laws for the roots of a random antisymmetric hermitian matrix // Nucl. Phys. A. 1968 V. 109. P. 449–456.
3. Edwards S., Jones R. The eigenvalue spectrum of a large symmetric random matrix // J. Phys. A. Math. Nucl. Gen. 1976. V. 9. P. 1595–1603.
4. Jones R., Kosterlitz J. M., Thouless D. J. Eigenvalue spectrum of a large symmetric random matrix with a finite mean // J. Phys. A. 1978. V. 11(3). L45–L48.
5. Kamenev A., Mezard M. Wigner-Dyson statistics from the replica method // J. Phys. A. 1999. V. 32(24). P. 4373–4388.

## Подход усеченного конформного пространства (TCSA) к неунитарным минимальным моделям

*А. Коцевич<sup>1,2</sup>, А. В. Литвинов<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН

<sup>3</sup>Центр перспективных исследований, Сколковский институт науки и технологий

Подход усеченного конформного пространства (Truncated Conformal Space Approach, TCSA) был впервые предложен в статье Юрова и Замолодчикова [1]. Идея подхода состоит в том, чтобы усечь гильбертово пространство до конечного числа конформных состояний, взяв состояния только из первых  $N$  энергетических уровней, сведя задачу поиска спектра гамильтониана  $H$  к численной диагонализации конечной матрицы. Подход дает непертурбативный метод вычисления спектра возмущенного гамильтониана. Юров и Замолодчиков применили этот подход к масштабируемой модели Ли–Янга (Scaling Lee–Yang Model, SLYM), соответствующей минимальной модели  $M_{2,5}$ . Взяв базис конформных состояний из первых  $N = 5$  энергетических уровней, они смогли достаточно точно описать спектр.

Для конформной теории поля на цилиндре радиуса  $R$  полный гамильтониан  $H$  состоит из невозмущенной части, которая может быть выражена в терминах генераторов алгебры Вирасоро  $L_0, \bar{L}_0$  и центрального заряда  $c$

$$H_{\text{CFT}} = \frac{2\pi}{R} \left( L_0 + \bar{L}_0 - \frac{c}{12} \right) \quad (1)$$

и релевантного возмущения  $V$

$$H = H_{\text{CFT}} + \lambda V = H_{\text{CFT}} + \lambda \int_0^R \phi_{\Delta, \Delta}(x) dx, \quad (2)$$

где  $\lambda$  — константа связи и  $\phi$  — одно из релевантных полей ультрафиолетовой CFT с конформной размерностью  $\Delta = \bar{\Delta}$  (возмущение может состоять из произвольного числа релевантных полей).

Собственное значение оператора  $L_0 + \bar{L}_0$  равно  $\Delta + \bar{\Delta} = 2\Delta$  и является масштабной размерностью поля.

Поскольку гамильтониан (2) коммутирует с оператором импульса

$$P = \frac{2\pi}{R} (L_0 - \bar{L}_0), \quad (3)$$

то гильбертово пространство факторизуется на секторы с заданным импульсом  $P = \frac{2\pi}{R}s$ , где  $s = L_0 - \bar{L}_0 \in \mathbb{Z}$  — спин.

Основной целью является вычисление матричных элементов  $V$  между конформными состояниями:

$$\langle \Delta_\beta | V | \Delta_\alpha \rangle = R \delta_{s_\beta, s_\alpha} \langle \Delta_\beta | \phi_{\Delta, \Delta}(0) | \Delta_\alpha \rangle. \quad (4)$$

Базис в гильбертовом пространстве можно строить из потомков квазипримарных полей  $L_{-1}^n |\Delta\rangle$ , задаваемых условием  $L_1 |\Delta\rangle = 0$ . Матричный элемент между потомками квазипримарных полей выражается через матричный элемент между квазипримарными полями:

$$\langle \Delta_\beta | L_1^k \phi_{\Delta, \Delta}(0) L_{-1}^n | \Delta_\alpha \rangle = n! k! \sum_{l=0}^{\min(n, k)} \frac{(\Delta_\beta + \Delta_\alpha - \Delta)(\Delta + \Delta_\alpha - \Delta_\beta)(\Delta + \Delta_\beta - \Delta_\alpha)}{l! (n-l)! (k-l)!} \langle \Delta_\beta | \phi_{\Delta, \Delta}(0) | \Delta_\alpha \rangle.$$

График зависимости энергии возмущенного гамильтониана от масштабного параметра  $r = mR$  для секторов различных спинов изображен на рис. 1. В нашей работе мы пробуем увеличить число уровней с  $N = 5$  до  $N = 15$  и проверить, как зависит точность спектра от числа взятых уровней.

В статье [2] рассматривается поток ренормализационной группы из минимальной модели  $M_{3,10}$  модель  $M_{3,8}$ . Минимальная модель  $M_{3,10}^{D_6} = M_{2,5} \otimes M_{2,5}$ . При возмущении некоторыми полями  $M_{3,10}$  можно попасть в  $M_{3,8}$ . Мы исследуем этот вопрос при помощи TCSA.

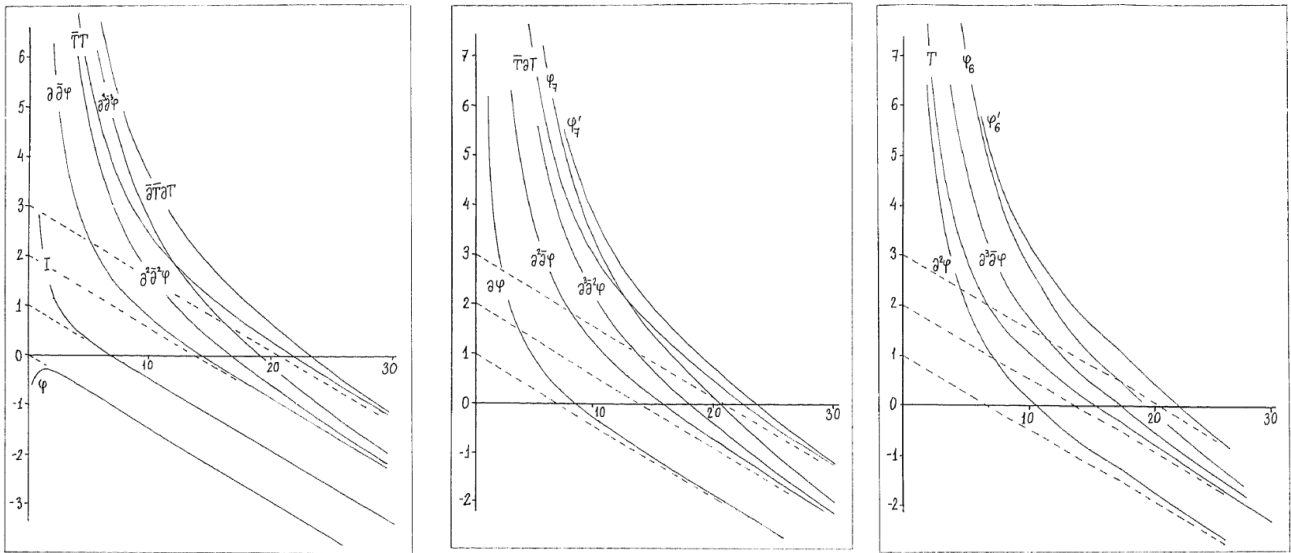


Рис. 1. Спектр возмущенного гамильтониана в модели Ли–Янга (слева — сектор спина 0 (первые 7 уровней), по центру — сектор спина (первые 6 уровней), справа — сектор спина 2 (первые 5 уровней))

### Литература

1. *Yurov V. P., Zamolodchikov A. B.* Truncated conformal space approach to scaling Lee–Yang model // *Int. J. Mod. Phys. A.* 1990. V. 5. P. 3221–3246.
2. *Klebanov I. R., Narovlansky V., Sun Z., Tarnopolsky G.* Ginzburg-Landau description and emergent supersymmetry of the (3,8) minimal model // *J. High Energ. Phys.* 2023. V. 2023: 66.

УДК 53:51

## Об уравнениях Бете конформной теории поля в квазиклассическом пределе

*П. Е. Орлов<sup>1</sup>, А. В. Литвинов<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН

<sup>3</sup>Центр перспективных исследований, Сколковский институт науки и технологий

Квантовые интегрируемые системы характеризуются бесконечным набором коммутирующих между собой операторов. Такие операторы называются интегралами движения. Такая структура коммутирующих операторов ставит задачу об их совместной диагонализации. Мощнейшим методом решения такой задачи является анзац Бете. Такой подход позволяет свести задачу диагонализации к решению системы нелинейных алгебраических уравнений. Однако явно решить эти уравнения удастся крайне редко. Настоящая работа посвящена изучению решений уравнений Бете для интегрируемой структуры конформной теории поля.

В любой конформной теории поля имеется бесконечный набор локальных интегралов движения [1]:

$$Q_1 = L_0 - \frac{c}{24}, \quad Q_3 = 2 \sum_{k=1}^{\infty} L_{-k} L_k + L_0^2 - \frac{c+2}{12} L_0 + \frac{c(5c+22)}{2880} \quad (1)$$

и т. д.

Операторы  $L_n$  являются модами голоморфной части тензора энергии-импульса  $T(z) = \sum_n L_n z^{-n-2}$ . Эти моды удовлетворяют соотношениям алгебры Вирассоро

$$[L_m, L_n] = (m-n)L_{m+n} + \frac{c}{12}(m^3 - m)\delta_{m,-n}, \quad (2)$$

где  $c$  — центральный заряд теории.

Уравнения Бете, описывающие спектр такой иерархии интегралов, имеют вид [2]

$$\prod_{j \neq i}^N \frac{(x_i - x_j - b)(x_i - x_j - b^{-1})(x_i - x_j + Q)}{(x_i - x_j + b)(x_i - x_j + b^{-1})(x_i - x_j - Q)} = \frac{(x_i + P + \frac{Q}{2})(x_i - P + \frac{Q}{2})}{(x_i + P - \frac{Q}{2})(x_i - P - \frac{Q}{2})}. \quad (3)$$

Здесь  $Q = b + b^{-1}$  и  $b$  — величины, параметризующие центральный заряд  $c = 1 + 6Q^2$ , а величина  $P$  параметризует конформную размерность  $\Delta = Q^2/4 - P^2$  модуля Верма, в котором действуют операторы (1). Собственные значения интегралов движения выражаются через корни Бете  $x_i$  с помощью симметрических полиномов.

Под квазиклассическим пределом в этой работе понимается предел больших центрального заряда и конформной размерности. В этом случае корни Бете допускают разложение по степеням  $b \rightarrow \infty$ :

$$x_i = \chi_i b + \tau_i + \alpha_i b^{-1} + O(b^{-2}), \quad \forall i \in \overline{1, N}. \quad (4)$$

Известно, что решения уравнений (3) нумеруются разбиениями числа  $N$ . Такая структура решений считается уже по первому порядку. Нам удалось зафиксировать первые три порядка в разложении (4) для любого разбиения. В частности, это позволяет найти выражения для собственных значений интегралов движения (1) в пределе большого центрального заряда.

Интегралы движения конформной теории поля (1) в пределе большого центрального заряда переходят в сохраняющиеся заряды классического уравнения Кортевега–де-Фриза. В этом смысле интегрируемую структуру конформной теории можно воспринимать как квантование теории КдФ (кКдФ). Альтернативный способ получения спектра в таком пределе — квазиклассическое квантование. Такой подход был реализован в работе [3]. Результаты для собственных значений интегралов движения находятся в согласии с выражениями, полученными нами.

Понимание того, как устроены решения уравнений Бете для кКдФ-иерархии, позволило нам изучить более общий случай уравнений (3). В левую часть этих уравнений можно добавить так называемый параметр твиста  $q$ . Это повысит степень уравнений и теперь решения будут нумероваться биразбиениями числа  $N$ . С физической точки зрения значение  $q$  задает рассматриваемую систему — набор коммутирующих интегралов движения. Тем самым рассматривается уже однопараметрическое семейство интегрируемых иерархий [2]. В этом случае нам удалось зафиксировать два лидирующих порядка в разложении корней Бете по степеням  $b$ . Как и для кКдФ, это дает возможность найти выражения для собственных значений в пределе большого центрального заряда.

В дальнейшем полученные результаты планируется применить для изучения on-shell векторов Бете, а также матричных элементов локальных операторов (формфакторов).

## Литература

1. *Bazhanov V.* [et al.]. Integrable structure of conformal field theory, quantum KdV theory and Thermodynamic Bethe Ansatz // Commun. Math. Phys. 1996. V. 177. P. 381–398.
2. *Litvinov A.* On spectrum of ILW hierarchy in conformal field theory // J. High Energ. Phys. 2013. V. 2013: 155.
3. *Dymarsky A.* [et al.]. Spectrum of quantum KdV hierarchy in the semiclassical limit // J. High Energ. Phys. 2022. V. 2022: 169.

УДК 530.1

## Двухпетлевая структура модели главного кирального поля

*П. В. Акацевич<sup>1,2,3,4</sup>, А. В. Иванов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский международный математический институт им. Леонарда Эйлера

<sup>2</sup>Санкт-Петербургское отделение Математического института им. В. А. Стеклова РАН

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

<sup>4</sup>Университет ИТМО

Данная работа посвящена исследованию двухпетлевого вклада в эффективное действие для двумерной модели главного кирального поля с группой  $SU(n)$ . Как известно, такой вклад содержит расходящиеся интегралы, поэтому отдельной важной задачей является регуляризация, которая превращает расходящиеся объекты в функции, сингулярные по дополнительному вспомогательному параметру. Наиболее

популярным типом регуляризации является размерная [1], потому что она сохраняет большую часть симметрий. Однако в ней также есть и недостатки, к примеру, она деформирует размерность пространства.

В представленной работе мы получаем сингулярную часть двухпетлевого вклада для регуляризации общего вида, а также сравниваем ответ с частными случаями, полученными ранее в других статьях. Метод вывода основан на использовании асимптотического разложения функции Грина по коэффициентам Сили–деВитта около диагонали.

Такая постановка задачи является полезной, поскольку общий вид двухпетлевого вклада двухмерной сигма-модели похож на аналогичный вклад в четырехмерной квантовой теории Янга–Миллса [2], являясь при этом более простым и наглядным.

Оба автора поддержаны Министерством науки и высшего образования РФ, грант 075-15-2022-289. Также работа А. В. Иванова частично поддержана фондом развития теоретической физики и математики «Базис», грант «Молодая математика России».

### Литература

1. *Jack I., Osborn H.* Two-loop background field calculations for arbitrary background fields // Nucl. Phys. B. 1982. V. 207. P. 474–504.
2. *Фаддеев Л. Д.* Замечания о расходимостях и размерной трансмутации в теории Янга–Миллса // ТМФ. 2006. Т. 148(1). С. 133–142; Theoret. and Math. Phys. 2006. V. 148(1). P. 986–994.

УДК 530.145

### Множественные зеркала и JKLMR-гипотеза

*Б. А. Еремин<sup>1,3,4</sup>, А. А. Белавин<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН

<sup>3</sup>Институт проблем передачи информации им. А. А. Харкевича РАН

<sup>4</sup>Сколковский институт науки и технологий

В работе [1] рассмотрена проблема выполнения гипотезы Джокерса и соавторов (JKLMR) о равенстве статистической суммы некоторой суперсимметричной калибровочной линейной сигма-модели на сфере  $S^2$  и экспоненты Кэлера потенциала на пространстве модулей многообразий Калаби–Яу. Данная проблема рассматривается для определенного класса Калаби–Яу, не относящегося к типу Ферма. Мы показываем, что гипотеза выполняется в случае, когда Калаби–Яу  $X(1)$ , не относящегося к типу Ферма, имеет зеркального двойника  $Y(1)$  во взвешенном проективном пространстве, которое допускает также наличие Калаби–Яу типа Ферма  $Y(2)$ . При этом зеркало  $X(2)$  для  $Y(2)$  имеет ту же специальную геометрию на пространстве модулей комплексных структур, что и исходное  $X(1)$ .

Зеркальная симметрия предполагает существование партнера  $Y$  для Калаби–Яу  $X$  такого, что их пространства модулей Кэлера  $M_K$  и комплексных структур  $M_C$  совпадают:

$$M_C(X) = M_K(Y), \quad M_K(X) = M_C(Y).$$

В работе [2] был предложен другой способ нахождения специальной геометрии на пространстве Кэлера модулей многообразий Калаби–Яу. Джокерс и соавторы предложили связь между Кэлеравым потенциалом  $K_K^Y$  на пространстве модулей Кэлера структур  $M_K(Y)$  многообразия Калаби–Яу  $Y$  и статистической суммой некоторой суперсимметричной калибровочной линейной сигма модели  $Z_Y$ . Гипотеза состоит в равенстве:

$$\exp(-K_K^Y) = Z_Y.$$

Роль многообразия  $Y$  играет пространство вакуумов сигма-модели.

В нашей работе мы демонстрируем справедливость JKLMR-гипотезы [2] явным вычислением для случая когда Калаби–Яу  $X$  не относится к типу Ферма и представляет собой зеркало некоторого семейства орбифолдов Калаби–Яу  $Y$ , лежащих во взвешенном проективном пространстве  $P^4(k)$ . Пространство  $P^4(k)$  допускает наличие в нем двух различных полиномов  $\mathcal{W}_{Y(1)}$  типа Ферма, и смешанного типа  $\mathcal{W}_{Y(2)}$  (цепь и Ферма), задающих орбифолды Калаби–Яу  $Y(1)$  и  $Y(2)$ . При этом их зеркала  $X(1)$  и  $X(2)$ , построенные по

конструкции Берглунда–Хубша–Кравица, лежат в разных взвешенных проективных пространствах  $P^4(k_1)$  и  $P^4(k_2)$ . Однако их периоды голоморфной нигде не исчезающей формы и Кэлеровы потенциалы пространства комплексных модулей совпадают:

$$K_C^{X(1)} = K_C^{X(2)}.$$

Это соотношение гарантирует нам выполнение JKLMR-гипотезы для неферма Калаби–Яу  $X(2)$ . Действительно, ведь Калаби–Яу  $X(1)$  имеет тип Ферма, и для него гипотеза была проверена, т. е. выполняется равенство

$$\exp(-K_C^{X(1)}) = Z_{Y(1)}.$$

Тогда мы доказываем JKLMR-гипотезу в виде

$$\exp(-K_C^{X(2)}) = Z_{Y(2)}.$$

Последнее равенство является проверкой зеркальной версии гипотезы для неферма Калаби–Яу  $X(2)$ .

### Литература

1. *Белавин А. А., Еремин Б. А.* Множественные зеркала и JKLMR-гипотеза // ТМФ. 2022. V. 213(1). P. 149–162.
2. *Jockers H., Kumar V., Lapan J. M., Morrison D. R., Romo M.* Two-SpherePartition Functions and Gromov-Witten Invariants // Commun. Math. Phys. 2014. V. 325. P. 1139–1170.



# Секция физики квантовых технологий

Председатель: Г. В. Шляпников (д. ф.-м. н., зав. кафедрой)

Зам. председателя: А. К. Федоров (к. ф.-м. н., профессор)

Секретарь: А. С. Мастюкова

Дата: 03.04.2023

Время: 10:00

УДК 530.145

## Влияние декогерентности на состояние кудита

*Д. А. Тарпанов<sup>1</sup>, Л. Е. Федичкин<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup>Физико-технологический институт им. К. А. Валиева

В настоящее время актуален вопрос использования квантовых блужданий в задачах квантовой обработки информации [1]. Для выполнения квантовых блужданий возможен переход к системам с большим числом состояний — кудитам. В таких системах квантовые блуждания происходят естественным образом. Примером реализации кудита может служить FinFET-структура (рис. 1).

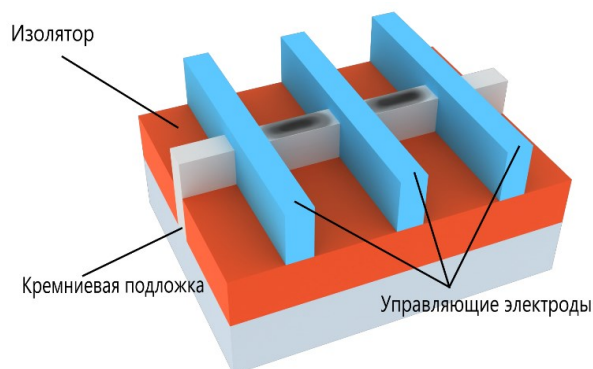


Рис. 1. Регистр квантового процессора на квантовых точках в кремниевом fin-канале

Эволюция электрона в системе квантовых точек описывается уравнением [3, 4]

$$\frac{d}{dt}\rho_{\alpha,\beta} = -i[H, \rho]_{\alpha,\beta} - \Gamma(1 - \delta_{\alpha,\beta})\rho_{\alpha,\beta}, \quad (1)$$

где  $H = \Omega \sum_{j,k} |j\rangle\langle k| T_{jk}$ ,  $T$  — матрица смежности,  $T_{ij} \in \mathbb{C}$ .

Для оценки меры декогерентности использована следующая формула [2]:

$$D = \max_{\rho_0 = |\psi\rangle\langle\psi|} \|\rho(t, \Gamma) - \rho(t, 0)\|_{\lambda} \quad (2)$$

где  $\|\sigma\|_{\lambda} = \max |\lambda(\sigma)|$ ,  $0 \leq D \leq 1$ .

Рассмотрены квантовые блуждания на отрезке длины  $N=16$ . Моделирование процесса квантовых блужданий проводилось путем численного решения уравнения (1) для поиска матриц плотности и перебора по формуле (2). Такой перебор позволяет получить нижнюю оценку для  $D$ . В результате численных

расчетов была получена зависимость  $D(t, \Gamma)$  (рис. 2). Для анализа поведения декогерентности на различных значениях времени приведены срезы по параметру  $\Gamma$  (рис. 3).

Полученные результаты могут быть использованы для определения области параметров  $\Gamma$  и  $t$ , в которых эволюция электрона сохраняет квантовый характер.

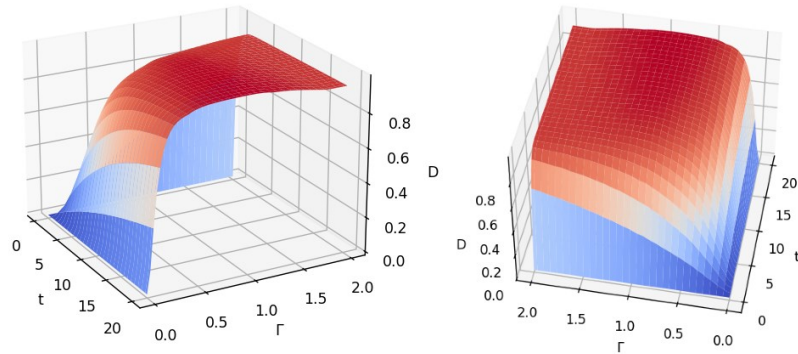


Рис. 2. Поверхности  $D(t, \Gamma)$

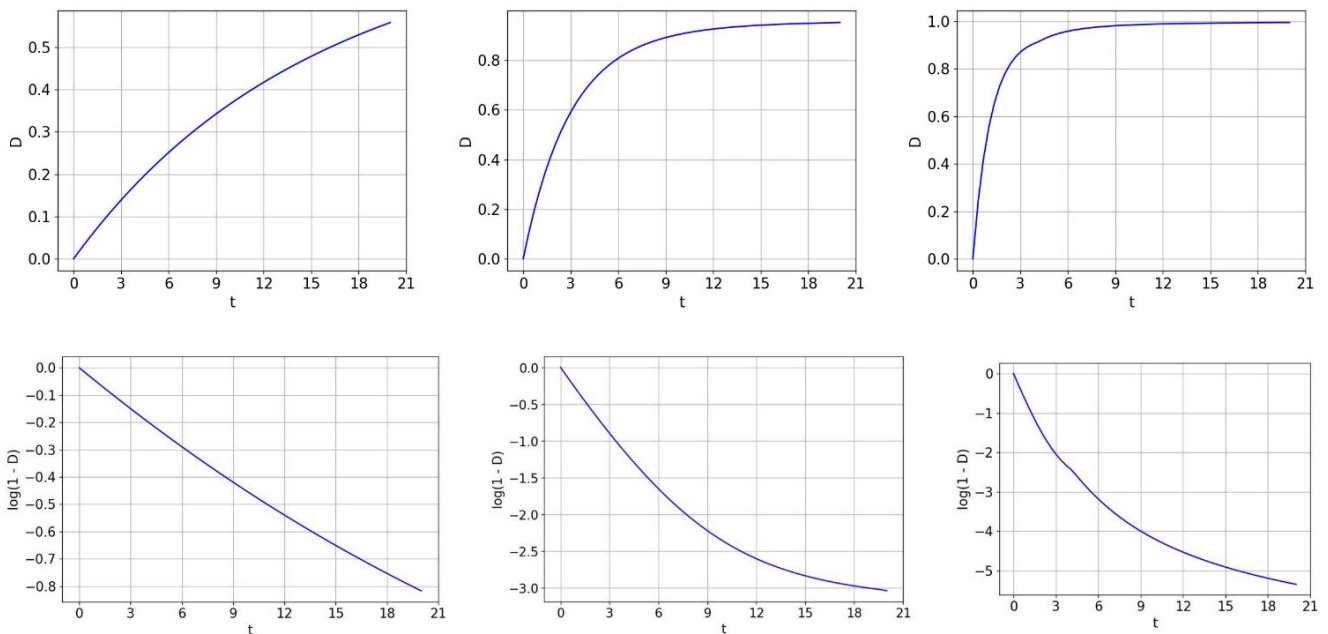


Рис. 3. Срезы поверхности  $D(t, \Gamma)$  (верхний ряд) и  $\log(1-D)$  (нижний ряд) при  $\Gamma = 0,1$  (первый столбец),  $\Gamma = 0,4$  (второй столбец) и  $\Gamma = 1$  (третий столбец)

### Литература

1. Fedichkin L. E., Meshchaninov F. P. Analysis and applications of quantum walks // J. Math. Sci. 2020. V. 252(1). P. 104–115.
2. Gurvitz S. A., Fedichkin L. E., Mozyrsky D., Berman G. P. Relaxation and the Zeno effect in qubit measurements // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91(6): 066801.
3. Solenov D., Fedichkin L. E. Continuous-time quantum walks on a cycle graph // Phys. Rev. A. 2006. V. 73(1): 012313.
4. Fedichkin L. E., Fedorov A., Privman V. Measures of decoherence // Proc. SPIE. 2003. V. 5105. P. 243–254.

## Destruction of quantum coherence in non-integrable billiards

*L. D. Silakov<sup>1,2</sup>, Ya. S. Lyakhova<sup>2,1</sup>, A. N. Rubtsov<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPhI

<sup>2</sup>Russian Quantum Center

At the moment, there is a well-developed theory of classical chaos. Back in 1898, Hadamard introduced a dynamical system [1], which is a point particle of mass  $m$ , which moves freely along a given two-dimensional surface, in the future called “billiard”. This system clearly demonstrated the typical behavior of irregular movement and marked the beginning of research in this area. One of the main identified characteristics of classical chaos is the exponential sensitivity of system to initial conditions, that is, its phase trajectories diverge at an exponential rate [2]. But in quantum physics there is no direct analogue to the phenomenon of chaos, because the sensitivity of the system to initial conditions is very weak. In this regard, it is customary to consider chaos caused by a small perturbation of the system's Hamiltonian by means of changing billiard shape [3].

The aim of this work is to observe the destruction of quantum coherence in non-integrable billiards on the example of the Bunimovich stadium [4]. The system under consideration is two-dimensional infinite potential well with impenetrable rounded walls.

As the first step we consider the response of the quantum system to the small perturbations of Hamiltonian in terms of its stationary states.

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi_{n(x,y)} = E_n \psi_{n(x,y)}. \quad (1)$$

$E_n$  is the energy corresponding to the observed state  $\psi_n$ . Here and in the following we set  $\hbar = m = 1$ . The measure for the proximity of states will be the Loschmidt echo [5] which is defined as

$$M = |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2. \quad (2)$$

Here  $\psi_1$  and  $\psi_2$  are states in two billiards with different wall shapes. In our case, the difference will be in the rounding radius  $r$  of one rounded wall of the Bunimovich stadium Fig. 1.

Table 1. Loschmidt echo values obtained for various energy levels

Energy level	1	50	150	250	500	750	1000
$M$	1.0	0.973	0.928	0.861	0.673	0.426	0.227

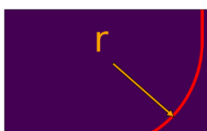


Fig. 1. Billiard wall of radius  $r$

We found that the system is sensitive to the shape of the billiard walls when comparing billiards with  $r = 20$  and  $r = 19$  (see Table 1). This phenomenon manifests itself in the fact that as the energy level increases, the states become less proximate to each other, as evidenced by the decrease in the value of the Loschmidt echo  $M \rightarrow 0$ .

To consider the dynamics of motion of quantum particle in billiard we use the Schrödinger equation:

$$-i \frac{d\psi}{dt} + H\psi = 0. \quad (3)$$

The initial state is a Gaussian wave packet

$$\psi_0 = A \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} - \frac{(y-y_0)^2}{2\sigma^2} + ipx\right). \quad (4)$$

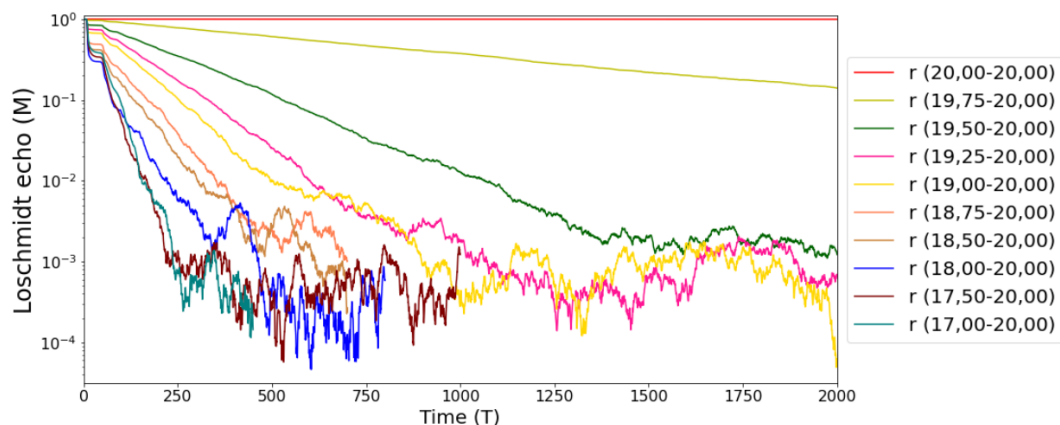


Fig. 2. Time dependence of the Loschmidt echo for several billiards with different rounding radius  $r$

In this equation  $A$  is the normalizing constant;  $p$  is the average momentum;  $\sigma$  is the half-width of the Gaussian wave packet;  $(x_0, y_0)$  are coordinates of the wave packet center.

We considered the billiards with different value of rounding radius, Loschmidt echo was calculated in projection onto states for  $r = 20,0$ . We see the exponential decay of  $M$  on Fig. 2, indicating quantum decoherence and the emergence of the phenomenon of quantum chaos. It can also be seen that as more the difference between the rounding radii, as shorter time the decoherence takes, and the graphs acquire a “fan-shaped” distribution.

Thus, we successfully observed the destruction of quantum coherence in a non-integrable Bunimovich billiard. We have also confirmed the sensitivity of the highly excited states to the small perturbation of the system's Hamiltonian. And, finally, it is worth noting the presence of a "fan-shaped" distribution of curves of the Loschmidt echo, which demonstrates a decrease of decoherence time with an increase of differences between billiards.

## References

1. *Hadamard J.* Les surfaces a courbures opposees et leurs lignes geodesique // *J. Math. Pures.* 1898. V. 4. P. 27–73.
2. *Lyapunov A. M.* Collected Works [in Russian]. Vol. 2. — Moscow: Izd. Akad. Nauk SSSR, 1956.
3. *Goussev A., Richter K.* Loschmidt-echo decay from local boundary perturbations // *Phys. Rev. E.* 2007. V. 75: 015201.
4. *Bunimovich L. A.* On the ergodic properties of nowhere dispersing billiards // *Commun. Math. Phys.* 1979. V. 65. P. 295–312.
5. *Peres A.* Stability of quantum motion in chaotic and regular systems // *Phys. Rev. A.* 1984. V. 30(4). P. 1610–1645.

УДК:004.056.55

## Влияние разной эффективности детекторов на финальный ключ в случае квантового канала спутник–Земля

*Е. И. Ивченко<sup>1,2,3</sup>, А. В. Хмелев<sup>1,2,3</sup>, В. Л. Курочкин<sup>1,3,4</sup>*

<sup>1</sup>Российский квантовый центр

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>3</sup>QSpace Technologies, Москва

<sup>4</sup>Центр квантовых коммуникаций Национальной технологической инициативы

Спутниковое распространение квантовых ключей на большие расстояния достигло значительных успехов [1, 2], но его практические схемы имеют недостатки. Одной из таких практических проблем в квантовом распределении ключей (КРК) «спутник–Земля» является несоответствие эффективности обнаружения состояний поляризационных фотонов, принимаемых наземной станцией. Это несоответствие включает в себя неодинаковую оптическую эффективность каналов поляризации и дисбаланс детекторов. Для волоконно-оптических систем с двумя детекторами изучалось влияние рассогласования эффективности на скорость генерации секретного ключа [3–5]. Используя полуэмпирическую модель КРК «спутник–Земля», мы исследуем влияние этого несоответствия на скорость получения секретной последовательности для системы с четырьмя детекторами.

Чтобы оценить безопасность практической реализации протокола КРК с четырьмя детекторами, мы используем следующие предположения.

1) Дисбаланс между принятием 0 и 1 в разных базисах одинаков и обозначается  $\eta$ .

2) Разбаланс между принятием базисов существует и обозначается  $t_{xz}$ . Значение аналогично  $\eta$ , но для базисов.

Следовательно, положительная операторнозначная мера (ПОВМ) для Боба может быть описана в следующем виде:

$$\begin{aligned} P_{z,0}^B &= p_z |0\rangle\langle 0|, P_{z,1}^B = p_z \eta |1\rangle\langle 1|, \\ P_{x,0}^B &= p_x t_{xz} |+\rangle\langle +|, P_{x,1}^B = p_x \eta t_{xz} |-\rangle\langle -|, \\ P_{\emptyset}^B &= I_3 - P_{z,0}^B - P_{z,1}^B - P_{x,0}^B - P_{x,1}^B, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $p_x$  и  $p_z$  — вероятности измерения для оснований  $X$  и  $Z$  соответственно.

При таких измерениях условия на наблюдаемые величины для матрицы плотности описываются следующим образом:

$$\begin{aligned} Tr \Gamma_1 \rho_{AB} &= t \eta (p_z + p_x t_{xz}), \\ Tr \Gamma_2 \rho_{AB} &= t \eta (p_z + p_x t_{xz}) Q, \\ Tr \Gamma_3 \rho_{AB} &= p_{\text{pass}}. \end{aligned} \quad (2)$$

Формула для скорости генерации финального ключа остается такой же, как и в статье [4], и значения  $t$ ,  $p_{\text{pass}}$  и  $\gamma_2$  изменяются в соответствии с условием (1). Она имеет следующий вид:

$$K(Q_z, Q_x, \eta, t, p_{\text{pass}}) = p_{\text{pass}} \left[ h\left(\frac{1+\delta}{2p_{\text{pass}}}\right) - h\left(\lambda(Q_x, \eta, t, p_{\text{pass}})\right) - h(Q_z) \right] \quad (3)$$

Мы выбрали реальные параметры нашей наземной станции с апертурой телескопа 600 мм [6], что дает  $\eta = 0,5$ ,  $t_{xy} = 0,75$ ,  $p_x, p_z = 0,5$ ,  $QBER = 0,047$ . На рис. 1 показана зависимость скорости генерации секретного ключа от эффективности передачи. Во время пролета спутника эффективность канала меняется в диапазоне с 0,001 до 0,003, что соответствует уменьшению финального ключа примерно на 20% при учете разбаланса детекторов.

Подводя итог, мы оценили влияние рассогласования эффективности обнаружения на итоговую ключевую скорость в спутниковой системе КРК и рассчитали границы для секретного ключа. Анализ показывает, что дисбаланс каналов поляризации в каждой базе измерений около 1 : 2 приводит к снижению ключевой скорости чуть менее чем на 20%.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030» (Стратегический проект «Квантовый Интернет»).

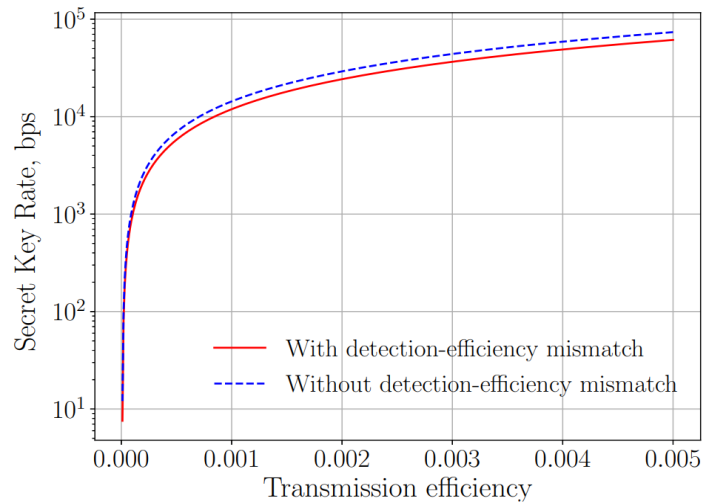


Рис. 1. Скорость генерации ключа для протокола с состояниями ловушками BB84 в зависимости от пропускания канала. Сплошная линия — с учетом разбаланса эффективностей детекторов 1 : 2; штриховая линия — отсутствие разбаланса эффективностей детекторов. Границы пропускания взяты из реальных параметров наземной станции и проводимого эксперимента.

### Литература

1. *Lu C. Y.* [et al.]. Micius quantum experiments in space // *Rev. Mod. Phys.* 2022. V. 94(3): 035001.
2. *Liao S. K.* [et al.]. Satellite-to-ground quantum key distribution // *Nature*. 2017. V. 549(7670). С. 43–47.
3. *Ma X.* [et al.]. Practical decoy state for quantum key distribution // *Phys. Rev. A*. 2005. V. 72(1): 012326.
4. *Bochkov M. K., Trushechkin A. S.* Security of quantum key distribution with detection-efficiency mismatch in the single-photon case: Tight bounds // *Phys. Rev. A*. 2019. V. 99(3): 032308.
5. *Trushechkin A.* Security of quantum key distribution with detection-efficiency mismatch in the multiphoton case // *Quantum*. 2022. V. 6: 771.
6. *Khmelev A. V.* [et al.]. Stellar calibration of the single-photon receiver for satellite-to-ground quantum key distribution // *J. Phys. Conf. Ser.* 2021. V. 2086(1): 012137.

УДК 530.145

### Quasiprobability model with minimal circuit negativity based on overcomplete frames

*D. A. Kulikov*<sup>1,2</sup>, *V. I. Yashin*<sup>2,4</sup>, *E. O. Kiktenko*<sup>2,3,4</sup>, *A. K. Fedorov*<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University)

<sup>2</sup>Russian Quantum Center

<sup>3</sup>National University of Science and Technology “MISIS”

<sup>4</sup>Mathematical Institute. V. A. Steklov of the Russian Academy of Sciences

The problem of classical simulation of dynamics in quantum systems is very important for understanding of the possible computational speedup in quantum computers in comparison to classical ones. The modern algorithms for classical simulation of quantum circuits predict exponential grows of the computational cost on the amount of certain resource: the number of T gates (or magic states) [1], contextuality [2] or negativity [3]. The last one seems to be the most natural and general resource since it applies to any quasiprobability representation of quantum mechanics.

Quasiprobability representation is an approach to description of quantum dynamics via quasistochastic matrices acting on quasiprobability distributions. Quantum circuits may be classically simulated using Monte Carlo sampling techniques applied to quasiprobability representations of the elements (states, gates, measurements) of a circuit. The effectiveness of the simulation is determined by the amount of negativity in the representation [4].

Latest studies in the field of quasiprobability representations exploit a concept of positive operator-valued measure (POVM), in particular minimal informational-complete (MIC-POVM) [5] or symmetric informational-complete (SIC-POVM) one [6] and concept of frames [7]. However, these works do not examine the case of overcomplete POVMs or frames.

In current work we propose a general quasiprobability representation framework for basic elements of quantum circuits. This framework is based on overcomplete frames. We also present a general protocol to compute the negativity of the elements and to find the quasiprobability representations which minimize the total negativity of the given circuits.

The main result of our work is the demonstration that circuit negativity decreases with growth of frame dimension and increase of depolarizing noise in system as it is shown on Fig. 1.

The work was supported by the Russian Science Foundation Grant No. 19-71-10091.

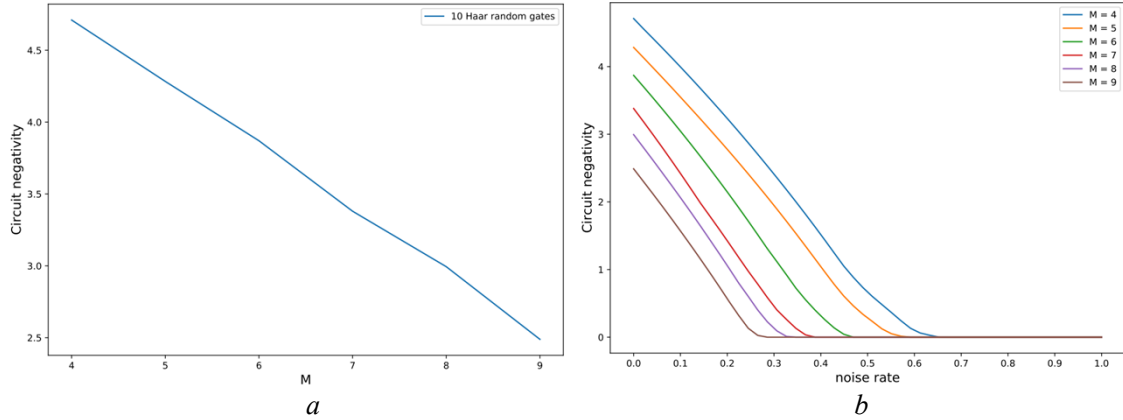


Fig. 1. Dependence of negativity on dimensionality  $M$  of frame for one-qubit circuit with 10 random gates (a); dependence of negativity on depolarizing noise in system for different frame dimensionalities (b)

### References

1. *Braviv S., Gosset D.* Improved classical simulation of quantum circuits dominated by clifford gates // *Phys. Rev. Lett.* 2016. V. 116(25):250501.
2. *Howard M., Wallman J., Veitch V.* [et al.]. Contextuality supplies the ‘magic’ for quantum computation // *Nature.* 2014. V. 510. P. 351–355.
3. *Veitch V.* [et al.]. Negative quasi-probability as a resource for quantum computation // *New J. Phys.* 2012. V. 14: 113011.
4. *Koukoulekidis N.* [et al.]. Faster Born probability estimation via gate merging and frame optimization // *Quantum.* 2022. V. 6: 838.
5. *Yashin V.I.* [et al.]. Minimal informationally complete measurements for probability representation of quantum dynamics // *New J. Phys.* 2020. V. 22: 103026.
6. *Kiktenko E. O.* [et al.]. Probability representation of quantum dynamics using pseudostochastic maps // *Phys. Rev. A.* 2020. V. 101: 052320.
7. *Pashayan H., Wallman J.J., Bartlett S.D.* Estimating outcome probabilities of quantum circuits using quasiprobabilities // *Phys. Rev. Lett.* 2015. V. 115: 070501.

УДК 538.915

### Attracting identical fermions in strongly disordered media

*L. I. Kniazeva<sup>1,2</sup>, V. I. Yudson<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup>Moscow Institute of Physics and Technology

<sup>2</sup>Russian Quantum Center

<sup>3</sup>Laboratory for Condensed Matter Physics, National Research University Higher School of Economics

The problem of interplay of interaction between particles and disorder has always been of great scientific interest [1–3]. In this work, we consider the limiting case of strong disorder when fermions are localized on sites but their arrangement depends on interaction. This problem has a fundamental interest and in practice it can be realized by spin-polarized electrons or cold atoms in optical traps [4].

We consider a very dilute gas of attracting identical fermions in a highly disordered medium. In the case when the hopping energy is much smaller than the width of the disorder, it is known that Anderson localization takes place in such systems [1]. So one can neglect the kinetic energy and describe the system with the following Hamiltonian:

$$H = \sum_{i=1}^N V_i n_i - U \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j, \quad (1)$$

where  $N$  — the number of sites,  $V_i$  — on-site energies which are set according to some probability distribution,  $n_i$  — the number of fermions on site  $i$  (0 or 1 fermion),  $-U$  — interaction energy of the nearest neighbors  $\langle i, j \rangle$ . Particularly, we consider a finite closed chain with uniform distribution of site disorder:

$$p(V_i) = \frac{\theta(W/2 - |V_i|)}{W}, \quad (2)$$

where  $W$  — the width of distribution.

The condition of realization of the bound pair means that the energy on the neighboring sites  $E_n = V_j + V_{j+1} - U$  is the minimum energy in the system. Due to the symmetry of the chain the probability  $P_n$  can be calculated as  $P_n = M \cdot P_{12}$ , where  $M$  — the number of possible pairs of neighbors and  $P_{12}$  — the probability that sites 1 and 2 are occupied. For ring of  $N$  sites  $M = N$ . Requiring the energy of the particles at sites 1 and 2 to be minimal, we can determine  $P_{12}$  as:

$$P_{12} = \langle \theta(V_N - V_2) \prod_{j=2}^{N-1} \theta(V_j + V_{j+1} - V_1 - V_2) \prod_{j=2}^{N-2} \prod_{l=j+2}^N \theta(V_j + V_l - V_1 - V_2 + U) \prod_{l=3}^{N-1} \theta(V_l - V_2 + U) \rangle, \quad (3)$$

where  $\langle \rangle$  means the average over disorder.

In our work we obtained the exact analytical dependence  $P_n(U/W)$  in the simplest nontrivial case  $N = 4$  (Fig. 1a):

$$P_n = 4[1/6 + 1/3U/W - 1/2(U/W)^2 + 1/3(U/W)^3 - 1/12(U/W)^4]. \quad (4)$$

Since the complexity of calculations, both analytical and numerical, increases rapidly with an increase in the number of sites in the chain, we have conducted a numerical experiment and, in addition, we have succeeded in analytical calculation of asymptotics for ranges  $U/W \ll 1/N$  and  $1/N \ll U/W \ll 1/\sqrt{N}$ . The asymptotics are as follows:

$$P_n = 2/N - 1 + U/W2N(N - 3)/(N - 2)(N - 1), U/W \ll 1/N, \quad (5)$$

$$P_n = 1 - N - 3/N - 1(1 - 2/N - 2)e^{-U^2N/W^2 + 1/N}, 1/N \ll U/W \ll 1/\sqrt{N}. \quad (6)$$

In Fig. 1b and Fig. 1c it is shown that these analytical asymptotics agree with the results of numerical experiment.

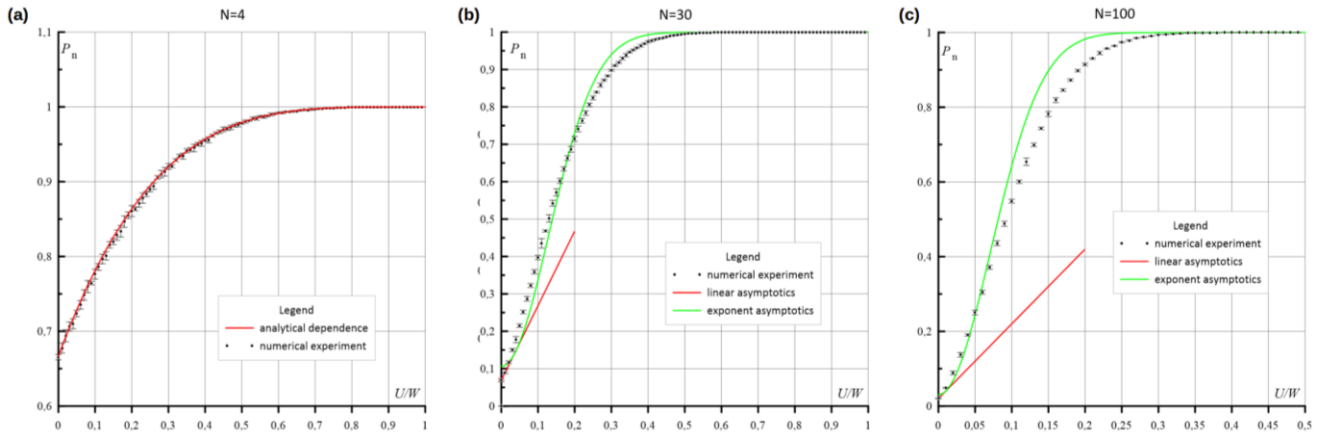


Fig. 1. Dependence of the probability to observe a bound state  $P_n$  on the ratio of interaction and disorder width  $U/W$  for number of sites  $N = 4$  (a),  $N = 30$  (b),  $N = 100$  (c).

## References

1. Anderson P. W. Absence of diffusion in certain random lattices // Phys. Rev. 1958. V. 109. P. 1492.
2. Mott N. F. Metal — insulator transition // Rev. Mod. Phys. 1968. V. 40. P. 677.
3. Turek M., John W. Localization of a pair of bound particles in a random potential // Physica E. 2003. V. 18. P. 530.
4. Köhl M., Moritz H., Stöferle T., Günter K, Esslinger T. Fermionic atoms in a three dimensional optical lattice: observing fermi surfaces, dynamics, and interactions // Phys. Rev. L. 2005. V. 94:080403.



## Тензорные сети для восстановления непрерывных волновых функций

*И. И. Рызов<sup>1</sup>, Е. С. Тиунов<sup>2</sup>, А. К. Федоров<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Quantum Research Center, Technology Innovation Institute, United Arab Emirates

<sup>3</sup>Российский квантовый центр, Москва

Рассмотрено применение тензорных сетей [1] для численного восстановления волновых функций в непрерывном базисе одномерного квантового гармонического осциллятора по набору квадратур. Для восстановления чистых состояний непрерывное пространство дискретизируется и проводится оптимизация функции максимального правдоподобия:

$$R(|\Psi\rangle; \{|x_{\theta_i}\}_{i=1}^N\}) = -\sum_{i=1}^N \log \frac{\langle \Psi | x_{\theta_i} \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = -\sum_{i=1}^N \log \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \Psi_{x_{\theta_i}}(x) dx}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \rightarrow \min, \quad (1)$$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma} M^{\sigma_1} M^{\sigma_2} \dots M^{\sigma_N} |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N\rangle, \quad (2)$$

$$|\Psi\rangle_i = \widehat{W}_i |\Psi_0\rangle + |b\rangle_i. \quad (3)$$

Здесь  $|\Psi\rangle$  — состояние, которое приближается к истинному и представлено в виде Matrix Product State (MPS) (2),  $\{|x_{\theta_i}\}_{i=1}^N$  — набор из  $N$  собственных состояний для оператора координаты в системе отсчета, повернутой на угол  $\theta$ :

$$\widehat{X}_{\theta} = \widehat{X} \cos \theta + \widehat{P} \sin \theta, \quad (4)$$

$\Psi_{x_{\theta_i}}(x)$  — волновая функция собственного состояния для оператора (4),  $\widehat{W}_i$  — оператор преобразования на  $i$ -й итерации,  $|b\rangle_i$  — константное смещение на  $i$ -й итерации,  $|\Psi_0\rangle$  — начальная инициализация состояния. Каждая новая итерация алгоритма оптимизирует (1) после применения линейного преобразования по формуле (3) к состоянию  $|\Psi_0\rangle$ . Все операторы и векторы представлены в виде одномерных тензорных сетей. Квадратуры интересующего состояния генерируются методом Монте-Карло.

Данный подход обусловлен тем фактом, что для восстановления квантовых состояний со сложной структурой, например частые осцилляции в состоянии «кота Шредингера» с большими мнимыми амплитудами, требуется высокое разрешение дискретизация пространства, что экспоненциально повышает сложность задачи. Однако одномерная тензорная сеть обеспечивает линейную сложность и низкую степень корреляции между масштабами дискретизации.

Для анализа качества алгоритма оптимизация была проведена для оптического квантового состояния «кота Шредингера» с разными амплитудами и результаты сопоставлялись с аналитическим представлением волновой функции соответствующих состояний. Сопоставление проводилось на основе анализа квантовой характеристики “fidelity”:

$$F(|\Psi\rangle, |\sigma\rangle) = |\langle \Psi | \sigma \rangle|^2.$$

Здесь  $|\Psi\rangle, |\sigma\rangle$  — чистые состояния.

На рис. 1 изображен результат оптимизации состояния оптического «кота Шредингера» с параметром когерентного состояния  $\alpha = 5i$ . Нижнее изображение отображает мнимую часть исходного состояния, верхнее — мнимая часть работы алгоритма. «Fidelity» составила  $0,987 \pm 0,003$  после оптимизации на 9000 квадратурах. Таким образом, разработанный алгоритм позволяет эффективно восстанавливать волновые функции квантовых состояний в непрерывном базисе по квадратурам этого состояния, которые могут быть получены путем гомодинного детектирования [2].

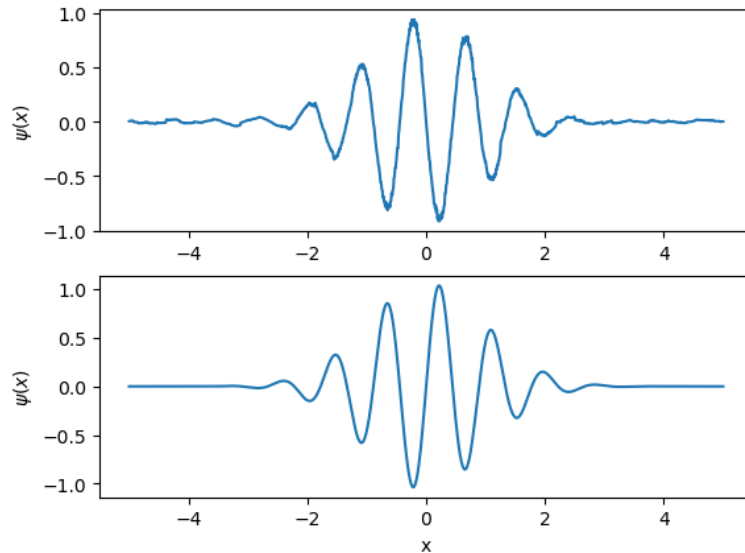


Рис. 1. Мнимая часть восстановленного состояния (верхнее) и мнимая часть исходного состояния «кота Шредингера» с амплитудой  $5i$  (нижнее)

В дальнейшем планируется применение похожего метода к смешанным состояниям, т. е. состояниям, которые представляются в форме оператора плотности  $\hat{\rho}$ .

### Литература

1. Schollwoeck U. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states // Ann. Phys. 2011. V. 326(1): 96.
2. Lvovsky A. I., Raymer M. G. Continuous-variable optical quantum-state tomography // Rev. Mod. Phys. V. 81(1): 299.

УДК 538.945

## Подбор параметров SQUID для реализации перестраиваемых резонаторов

И. Е. Тарасова<sup>1</sup>, И. А. Нажесткин<sup>2</sup>, Д. С. Яковлев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Российский квантовый центр

Одним из необходимых элементов для исследования кубитов являются сверхпроводящие резонаторы. Они используются для считывания кубита неразрушающим способом — в зависимости от состояния кубита, помещенного в резонатор, наблюдается дисперсионный сдвиг резонансной частоты. Настройка резонансной частоты для более точного определения состояния кубита может осуществляться с помощью внешнего магнитного поля, если в конец резонатора будет встроен SQUID.

Сверхпроводящие квантовые интерферометры (SQUID) нелинейно меняют индуктивность во внешнем магнитном поле [1]:

$$L_{\text{SQUID}}(\Phi) = \frac{\Phi_0}{4\pi I_{\text{CO}} |\cos(\pi\Phi/\Phi_0)|} \quad (1)$$

где  $\Phi_0$  — квант магнитного потока,  $\Phi$  — внешний магнитный поток,  $I_{\text{CO}}$  — критический ток SQUID в отсутствие внешнего магнитного поля. Изменение индуктивности SQUID, встроенного в резонатор, влияет на его резонансную частоту:

$$\nu_{\text{res}}(\Phi) = \frac{1}{4\sqrt{[L_{\text{res}} + L_{\text{SQUID}}(\Phi)]C}} \quad (2)$$

здесь  $L_{\text{res}}$ ,  $C$  — индуктивность и емкость резонатора без встроенного SQUID,  $L_{\text{SQUID}}(\Phi)$  — индуктивность SQUID, определяемая выражением (1).

В работе подбираются параметры SQUID на основе дайемовских мостиков для последующего применения в перестраиваемых внешним магнитным полем резонаторах. Доклад можно разделить на три части: моделирование перестраиваемого резонатора, изготовление и измерение пробных образцов и оценка геометрических индуктивностей SQUID для создания нового дизайна. Основная задача — достичь наибольшего изменения резонансной частоты микроволнового резонатора со встроенным SQUID во внешнем магнитном поле с минимальным уменьшением добротности резонатора. При этом резонатор должен быть изготовлен по технологии, совместимой с «кубитной».

Был промоделирован сдвиг резонансной частоты во внешнем магнитном поле — методом конечных элементов система, состоящая из четвертьволнового резонатора и SQUID, была представлена набором индуктивностей, сопротивлений, емкостей и нелинейных джозефсоновских элементов. Система дифференциальных уравнений, полученных из записи законов Кирхгофа для каждого узла модельной цепи, численно решена программой, написанной на C++. Получены зависимость максимального бездиссипативного тока через интерферометр от внешнего потока, АЧХ резонатора при различных значениях индуктивностей плеч SQUID и внешнего магнитного потока, зависимость смещения резонансной частоты резонатора от индуктивностей плеч SQUID. Результаты моделирования показали, что при меньшей безразмерной индуктивности SQUID (безразмерная индуктивность — суммарная индуктивность, нормированная на джозефсоновскую:  $I = L/L_J$ ) достигается большая перестройка резонансной частоты. При этом уменьшение размеров SQUID, которое приводит к уменьшению индуктивности, осложнено технологическими сложностями и приводит к гистерезисному поведению.

Изготовлены и измерены пробные SQUID с диаметрами 1–6 мкм, шириной сужений 30 нм и 80 нм, длиной сужений 60 нм (рис. 1). Структуры изготовлены методом электронно-лучевой литографии на кремниевой подложке из двухслойной пленки Al/Pt 20 нм/5 нм. Платиновое покрытие шунтирует SQUID, уменьшая гистерезис, и защищает от оксидного слоя, характерного для алюминиевых пленок. Изготовление и результаты измерений SQUID подробно описаны в статье [2]. Однако в связи с технологическими сложностями и большой индуктивностью SQUID возникла необходимость в создании другого дизайна.

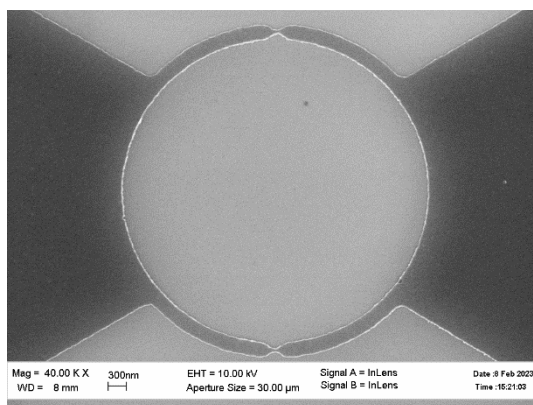


Рис. 1. Изображение SQUID старого дизайна с СЭМ (сужения 60 нм×30 нм, внутренний диаметр кольца 5 мкм)

При создании нового дизайна подбирались параметры сужений и площадь кольца интерферометра. Для сужений учитывалось, что нелинейные свойства дайемовских мостиков SQUID проявляются при длине не более  $2,5\xi$  — длины когерентности ( $\xi \approx 80$  нм для нашей пленки). При этом, чем меньше длина мостика, тем более нелинейна его ток-фазовая характеристика и больше глубина модуляции. Чтобы мостик можно было считать «слабой связью», его ширина должна быть того же порядка или меньше  $\xi$ .

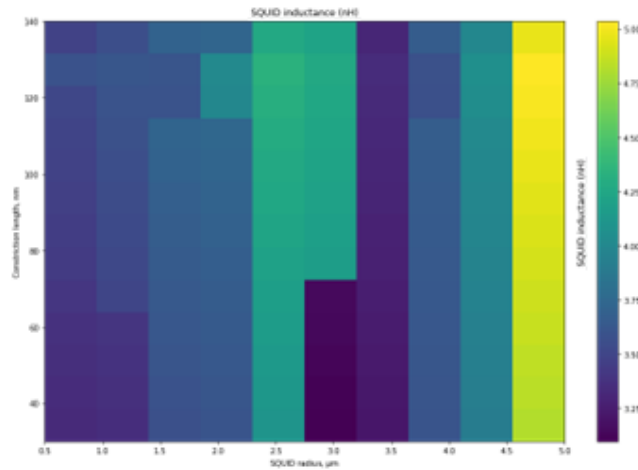


Рис. 2. Зависимость индуктивности SQUID (показана цветом) от длины сужений (по вертикали) и размеров кольца интерферометра (по горизонтали)

Площадь кольца интерферометра непосредственно влияет на геометрическую индуктивность SQUID. Аналитически оценить ее сложно, связь между потоком, проходящим через кольцо, и током, протекающим через интерферометр, зависит от геометрии SQUID. Расчет был проведен в данной работе в программе 3D-MLSI для дизайна более легкого в изготовлении, чем предыдущий. На рис. 2 показана полученная зависимость индуктивности SQUID от длины сужений и размеров кольца интерферометра. Это позволяет подобрать нужные параметры SQUID.

На данный момент изготавливаются SQUID нового дизайна.

Таким образом, полученные результаты могут быть полезны для моделирования планарных сверхпроводящих цепей, подбора параметров и изготовления SQUID и других квантовых наноструктур.

### Литература

1. *Kennedy O. W.* [et al.]. Tunable Nb superconducting resonator based on a constriction nano-SQUID fabricated with a Ne focused ion beam // *Phys. Rev. Appl.* 2019. V. 11: 014006.
2. *Yakovlev D. S., Nazhestkin I. A.* [et al.]. Controlling I-V hysteresis in Al/Pt bilayer symmetric SQUIDs at Millikelvin temperatures // *Symmetry*. 2023. V. 15(2). P. 550

УДК 533.922

### Исследование динамической модели затягивания диодного лазера на микрорезонатор с модами «шепчущей галереи»

*Д. М. Сокол<sup>1,2</sup>, А. Е. Сахарова<sup>1,2</sup>, А. Е. Шитиков<sup>1,2,3</sup>, Д. А. Чермошнев<sup>1,2,4</sup>, И. А. Биленко<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Российский квантовый центр

<sup>3</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

<sup>4</sup>Сколковский институт науки и технологий (Сколтех)

Создание узкополосных и высокостабильных лазеров является одной из ключевых задач фотоники. Такие лазеры открывают уникальные возможности в ряде прогрессивных областей, таких как когерентная связь, атомные часы, астрономия, и в других. Лазеры с узкой шириной линии используются в когерентных доплеровских лидарах для измерения вихревого следа самолета, обнаружения аэрозолей и дистанционных спектроскопических измерений. Высокостабильные одночастотные лазеры имеют решающее значение в системах с обратной синтезированной апертурой, которые активно используются для мониторинга и контроля космического мусора, классификации объектов на больших расстояниях с пространственным разрешением далеко за дифракционным пределом приемной апертуры и создания источников квантовых состояний света [1, 2].

Одним из методов реализации таких лазеров является эффект затягивания диодного лазера на собственные моды интегрального кольцевого микрорезонатора за счет частотно-селективной обратной связи. Данная связь возникает в связи с Рэлеевским рассеянием излучения на объемных и поверхностных

дефектах внутри микрорезонатора и возникновением при этом обратной волны, усиливающейся за счет высокой добротности [3].

Несмотря на то, что эффект затягивания достаточно давно исследуется, существует ряд параметров, которые приводят к новым режимам работы устройства. В данной работе рассматривается зависимость влияния потерь в системе диод-микрорезонатор на режим затягивания лазера и теоретически исследован эффект возникновения расщепления зоны затягивания на две с различными стабилизированными частотами [4]. Было продемонстрировано, что увеличение потерь в системе приводит к переходу лазера в режим с расщеплением и влияет на ширину расщепленных зон затягивания. Теоретически предсказанное расщепление линии затягивания было подтверждено экспериментальными данными.

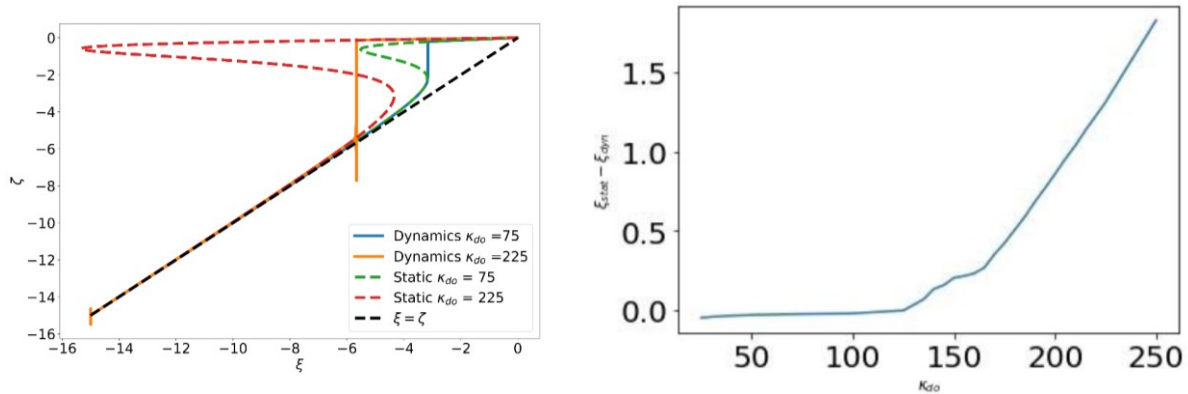


Рис. 1. Сравнение динамической и статической моделей затягивания в зависимости от различных значений  $\kappa_{do}$ . Штриховыми линиями показаны результаты моделирования статической модели. Сплошными линиями изображены результаты моделирования динамической модели для тех же параметров. При увеличении  $\kappa_{do}$  проявляется более ранний, чем в статической модели вход в режим затягивания. Справа представлен график зависимости различия статической и динамической моделей от величины  $\kappa_{do}$

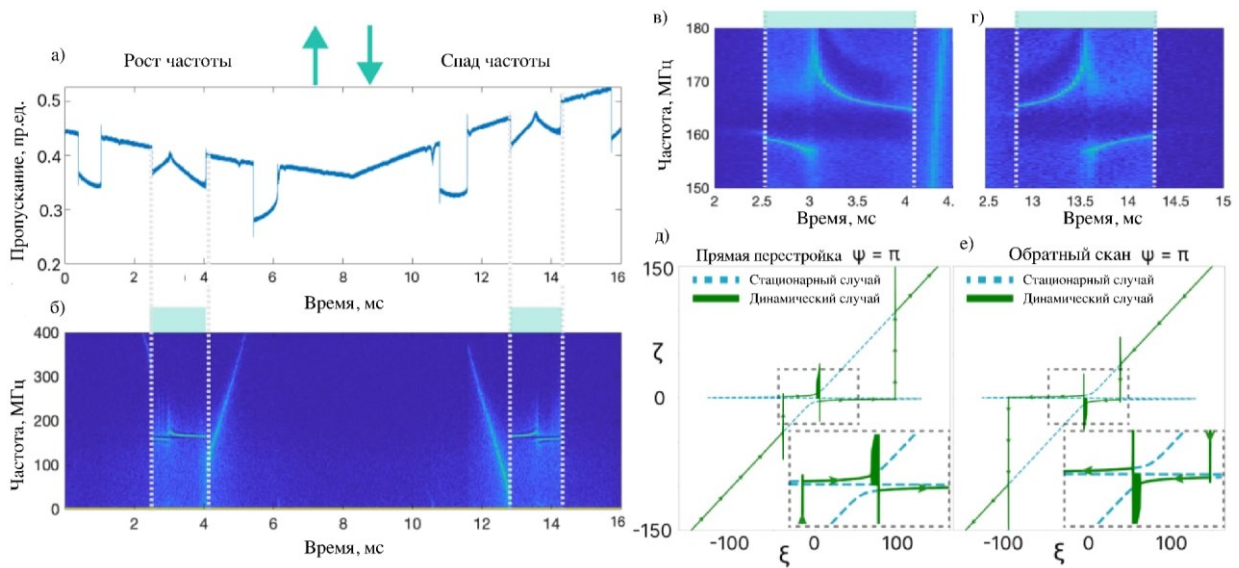


Рис. 2. Динамика затягивания для фазы затягивания  $\psi = \pi$ . Прошедшая мощность представлена на верхнем графике *a*. Спектрограмма сигнала биений затянутого и референсного лазеров представлена на рисунке *б*. На панелях (*в, з*) представлены увеличенные участки спектрограммы, соответствующие диапазонам затягивания. Результаты моделирования представлены на нижних панелях (*д, е*). На вставке представлены увеличенные участки кривых пропускания. Аналитические стационарные решения показаны синей штриховой линией, а динамическое моделирование — сплошной зеленой линией.

Случай  $\psi = \pi$  симметричен при прямом и обратном скане частоты. В этом режиме может произойти расщепление перестроенной кривой (см. рис. 2*б, в, д*). Положение перескока чрезвычайно чувствительно к фазе затягивания. Величина скачка зависит от добротности и исчезает в перегруженном режиме, когда  $\kappa$  становится доминирующим фактором потерь, но сохраняется в режиме слабой связи, когда добротность еще высока. Это явление можно объяснить следующим образом: благодаря высокой

добротности микрорезонатора даже слабые амплитуды приходящих волн могут резонансно усиливаться и рассеиваться (коэффициент обратного рассеяния  $1/150$ ) лазерное излучение.

Таким образом, ширина линии излучения лазера вызывает спонтанный переход частоты излучения лазера на ветвь с более высоким коэффициентом стабилизации (см. рис. 2*d, e*). Мы выполнили динамическое моделирование затягивания и обнаружили, что такой спонтанный переход возможен после определенного значения добротности микрорезонатора (см. зеленые линии рис. 2*d, e*). Подобные спонтанные переходы также наблюдались в нелинейном режиме в [5]. Отметим, что скоростные уравнения лазерного излучения автоматически генерируют ненулевую ширину линии при моделировании из-за численного шума.

Как видно на рис. 2, экспериментальные наблюдения ( $\nu$ ,  $z$ ) полностью согласуются с теоретическим моделированием динамики SIL ( $\delta$ ,  $e$ ) и соответствующими разбиениями для прямого и обратного сканирования в случае  $\psi = \pi$  присутствуют.

## Литература

1. Kondratiev N. M. [et al.]. Recent advances in laser self-injection locking to high-Q microresonators // Front. Phys. 2023. V. 18: 21305.
2. Chermoshentsev D. A. [et al.]. Dual-laser self-injection locking to an integrated microresonator // Opt. Express. 2022. V. 30(10). P. 17094–17105.
3. Kondratiev N. M. [et al.]. Self-injection locking of a laser diode to a high-Q WGM microresonator // Opt. Express. 2017. V. 25(23): 28167.
4. Shitikov A. E. [et al.]. Optimization of laser stabilization via self-injection locking to a whispering-gallery-mode microresonator: experimental study // Opt. Express. 2023. V. 31(1). P. 313–327
5. Voloshin A. S. [et al.]. Dynamics of soliton self-injection locking in optical microresonators // Nat. Commun. 2021. V. 12(1): 235.

УДК 533.922

## Исследование нелинейной динамики затягивания двух диодных лазеров на моды интегрального кольцевого резонатора

*А. Г. Сахарова<sup>1,2</sup>, А. Н. Данилин<sup>2,3</sup>, В. Е. Лобанов<sup>2</sup>, Д. А. Чермошенцев<sup>1,2,4</sup>, А. Е. Шитиков<sup>1,2,3</sup>, И. А. Биленко<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup> Российский квантовый центр

<sup>3</sup> Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

<sup>4</sup> Сколковский институт науки и технологий (Сколтех)

В настоящее время интегральные технологии, в частности, высокодобротные интегральные кольцевые микрорезонаторы, рассматриваются как перспективные средства для реализации квантовых состояний света и оптических частотных гребенок в силу своей компактности и низких оптических потерь [1].

Эффективный способ получения компактных источников сжатых состояний света и гребенок — с помощью явления затягивания лазерных диодов на моды интегрального кольцевого резонатора. Эффект затягивания позволяет улучшить выходные характеристики лазерного диода: уменьшить ширину линии лазера вплоть до герцевых значений и значительно подавить шумы. Таким образом, реализуется возможность генерировать квантовые состояния света и оптические гребенки в различных диапазонах длин волн.

В нашей работе исследуется динамика генерации параметрического сигнала в системе с двумя накачками [2]. Используются два лазерных диода с длинами волн 1535 нм и 1537 нм, настроенные на собственные частоты микрорезонатора, разнесенных на 4 области свободной дисперсии (ОСД) друг от друга. Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1.

Диоды связаны с интегральным высокодобротным микрорезонатором и одновременно затянуты на разные частоты микрорезонатора. Таким образом, получается стабильный узкополосный бихроматичный сигнал. Были использованы кольцевые интегральные микрорезонаторы с аномальной дисперсией групповых скоростей.

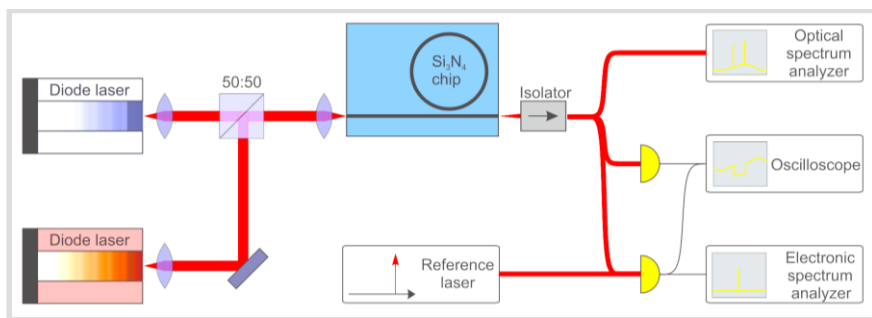


Рис. 1. Схема экспериментальной установки с двумя лазерными диодами, связанными с высокодобротным интегральным микрорезонатором из Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>

Динамика процесса генерации параметрической гребенки исследуется с помощью метода спектрограмм оптического и радиочастотного сигналов при перестройке одного из двух диодных лазеров, полученных с помощью гетеродинирования референсным лазером Tortica CTL 1550. На выходе из чипа наблюдаются провалы мощности излучения в области токов лазерного диода 452,5÷454 мА (рис. 2а), что соответствует режиму гребенки с межмодовым расстоянием в 1 ОСД на оптической спектрограмме (рис. 2б).

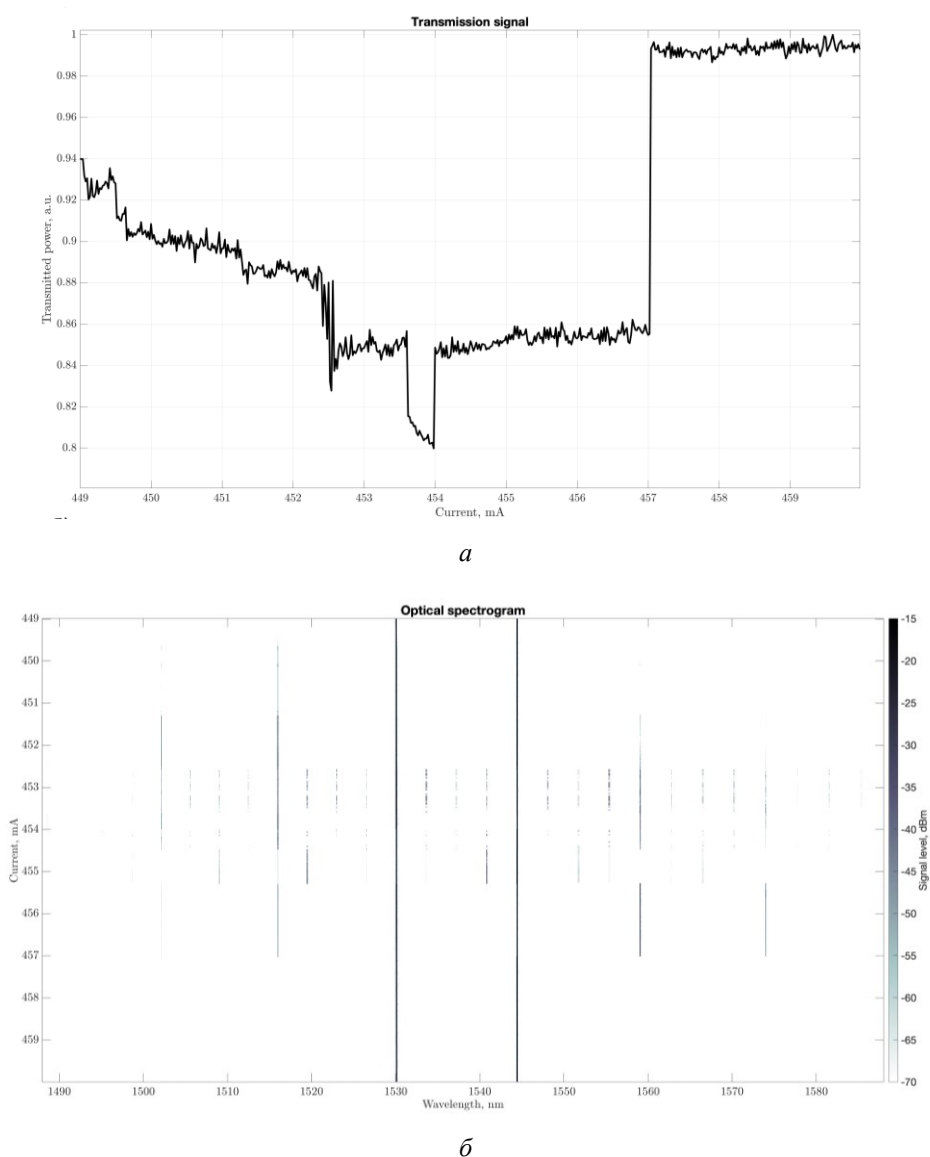


Рис. 2. Оптический спектр сигнала двух затянутых лазеров (а); сигнал пропускания на выходе из микрорезонатора с заметным провалом, демонстрирующим переход в режим затягивание (б)

Было проведено сравнение фазовых шумов для каждого из затянутых лазеров с их шумами в свободном режиме работы (вне режима затягивания). На спектрограмме, описывающей спектральную плотность фазовых шумов, в затягивании сигнал опускается до значения 1 кГц для первого диода и до 10 кГц для второго, что указывает на снижение уровня шума лазеров и их стабилизацию.

Таким образом, нами были получены данные о динамике возбуждения оптической гребенки при затягивании двух лазерных диодов на разные частоты кольцевого интегрального микрорезонатора с аномальной дисперсией; проанализирован спектр фазового шума, позволяющий оценить эффективность стабилизации лазеров путем затягивания.

Дальнейшее изучение динамики процесса генерации параметрического сигнала в системах с аномальной и нормальной дисперсии в режиме одновременного затягивания двух лазерных диодов позволит получать стабильный сигнал на более протяженное время и приведет к дальнейшему созданию компактных источников гребенок и сжатых состояний света. Полученные результаты могут быть использованы для производства компактных устройств на основе затягивания, получения сжатых состояний света, а также реализации когерентной машины Изинга [1] для решения сложных оптимизационных задач.

### Литература

1. *Okawachi Y., Yu M., Jang J. K.* [et al.]. Demonstration of chip-based coupled degenerate optical parametric oscillators for realizing a nanophotonic spin-glass//Nat. Commun. 2020. V. 11: 4119. DOI: 10.1038/s41467-020-17919-6.
2. *Chermoshentsev D. A.* [et al.]. Dual-laser self-injection locking to an integrated microresonator//Opt. Express. 2022. V. 30(10). P. 17094–17105. DOI: 10.1364/OE.454687.
3. *Valentinuzzi E.* [et al.]. Group velocity dispersion tailoring in optical structures//Proc. SPIE. 1995. V. 2449. DOI: 10.1117/12.201980.

УДК 535.015

## Наносекундные импульсы в атаке на локальный осциллятор в системах квантового распределения ключа на непрерывных переменных

*П. А. Морозова, М. Е. Геллерт, Б. А. Наседкин*

Университет ИТМО

В системах квантового распределения ключа на непрерывных переменных (КРК НП) используется когерентный метод детектирования квадратур сигнала, с помощью которого передается криптографический ключ. Основным компонентом блока когерентного детектирования является балансный детектор. Квадратурные амплитуды состояний сигналов измеряются путем смешивания их с локальным осциллятором, имеющим известные фазу и амплитуду [1].

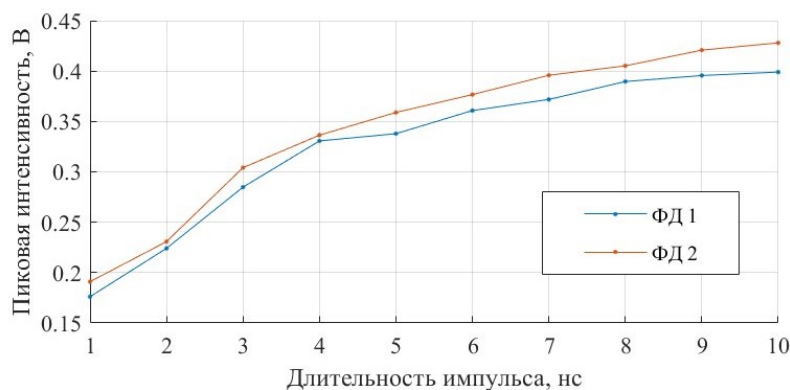


Рис. 1. Зависимость пиковой интенсивности от длительности наносекундных импульсов для двух каналов балансного детектора

Существующие атаки на локальный осциллятор проводятся с целью незаметного внедрения нарушителя в сигнальный канал. Обоснование реализуемости данного типа атак на примере исследования отклика по интенсивности балансного детектора в зависимости от длительности наносекундных импульсов было проведено экспериментально. Получены данные об откликах фотодиодов на основе InGaAs для балансного детектора с шириной пропускания 200 МГц в зависимости от длительности импульсов в



диапазоне от 1 до 10 нс (рис. 1). Для линейного режима работы фотодиодов интенсивность пропорциональна уровню избыточного шума [2]. Проиллюстрировано, что импульсы малой длительности (единицы наносекунд) вследствие низкой интенсивности не вносят существенного уровня шумов.

Для мониторинга систем КРК НП используется уровень избыточного шума [3]. Уменьшение длительности импульсов локального осциллятора влечет снижение уровня избыточного шума в данном канале и во всей системе КРК НП. В таком случае, при увеличении избыточного шума в сигнальном канале нарушитель остается незамеченным, поскольку изначальный допустимый уровень шума во всей системе сохраняется.

### Литература

1. *Laudenbach F.* [et al.]. Continuous-variable quantum key distribution with Gaussian modulation — the theory of practical implementations // *Adv. Quantum Technol.* 2018. V. 1: 1800011.
2. *Du S., Li Z., Liu W., Wang X., Li Y.* High-speed time-domain balanced homodyne detector for nanosecond optical field applications // *JOSA B.* 2018. V 35(2). P. 481–486.
3. *Huang D., Huang P., Lin D., Zeng G.* Long-distance continuous-variable quantum key distribution by controlling excess noise // *Sci. Rep.* 2016. V. 6(1): 19201.

UDC 53.06

## Parallel entanglement in mixed-species ion chains using optical tweezers

*N. A. Sterligov, O. Y. Lakhmanskaya, L. A. Akopyan, K. E. Lakhmanskiy*

Russian Quantum Center

Mixed species ion configurations have several advantages in the field of quantum computation. In particular, they can be used in sympathetic cooling, for quantum logic spectroscopy, for photonic interconnects, and overall to tackle different scalability issues in ion based quantum computers. One of the main problem in such systems is to achieve good coupling between different masses due to high normal modes mismatch [1].

In the present work, we examine parallel entangling gate fidelities in the ion crystal comprised of four  $^{40}\text{Ca}^+$  ions and one ancilla ion  $^{48}\text{Ca}^+$ . Optical tweezer was applied to the  $^{40}\text{Ca}^+$  ion which modified the secular frequency of the ion as follows  $\tilde{\omega}_{\text{sec}} = \sqrt{\omega_{\text{sec}}^2 - \omega_{\text{tw}}^2}$ , where  $\omega_{\text{sec}}$  — secular frequency of the target ion,  $\omega_{\text{tw}}$  — effective frequency that approximates tweezer's potential as the harmonic one. Thanks to the tweezer, the ions of different masses share the same motional modes, as shown in fig. 1. As a consequence, we can increase the fidelity of mixed species entanglement operation, which was further proven by numerical computations, shown in fig. 2. We have also modelled parallel entangling operations for the species of the same mass [2]. For this, we used the following Mølmer-Sørensen gate propagator

$$\hat{U} = \exp \left( \sum_{j=1}^4 \sum_{k=1}^N (\alpha_k^j(t) \hat{a}_k^+ - \alpha_k^{j*}(t) \hat{a}_k) \hat{\sigma}_x^j + i \sum_{i,j=1}^4 \chi^{i,j} \hat{\sigma}_x^i \hat{\sigma}_x^j \right),$$

$$\alpha_k^j = \eta_k^j \int_0^\tau \Omega(t) \sin(\mu^j t) e^{i\omega_k t} dt,$$

$$\chi^{i,j} = \sum_{k=1}^N \eta_k^i \eta_k^j \int_0^\tau dt' \int_0^{t'} (\sin(\mu^i t) \sin(\mu^j t') \Omega^i(t) \Omega^j(t') + \sin(\mu^i t') \sin(\mu^j t) \Omega^i(t') \Omega^j(t)) \sin(\omega_k(t' - t)) dt,$$

where  $\eta_k^j$  — Lamb-Dicke parameter,  $\mu^i$  — detuning of the bichromatic field on ion  $i$ ,  $\Omega(t)$  — Rabi frequency,  $\tau$  — gate duration,  $\omega_k$  — frequency of normal mode  $k$ . We have developed a method that allows one to find optimal, amplitude modulated piecewise Rabi pulses for two pairs that are being entangled simultaneously with fixed number of segments in the pulse.

Here we entangle the first  $^{48}\text{Ca}^+$  ion and the second  $^{40}\text{Ca}^+$  ion with tweezer applied while two subsequent  $^{40}\text{Ca}^+$  ions are being entangled as well. For each pair and for every  $\omega_{\text{tw}}$  we calculate the fidelity of the parallel entangling gate. The shape of the gate pulse was optimized using segmentation technique [2].

The achieved fidelities and maximum values of Rabi frequencies are shown in fig. 2. Optimal values for both fidelities and Rabi pulses with respect to tweezer frequencies coincide with the optimal one that was obtained from the above considerations about the equality of secular frequencies of the ions.

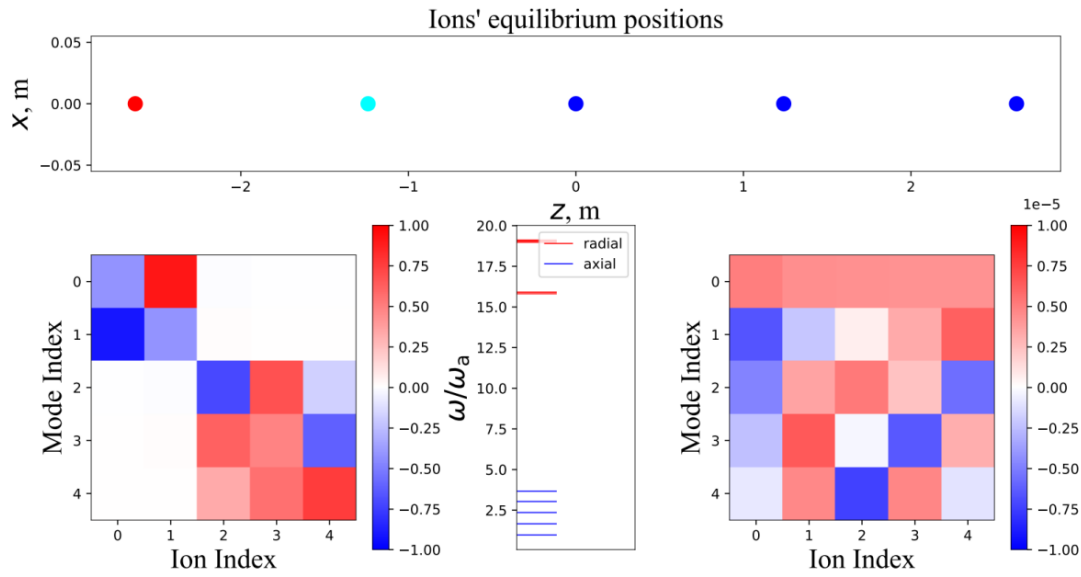


Fig. 1. The upper part represents the linear Coulomb crystal, where the red dot is  $^{48}\text{Ca}^+$ , the cyan dot is  $^{40}\text{Ca}^+$  with tweezer, blue dots are  $^{40}\text{Ca}^+$  ions; the lower left side is a schematic structure of radial normal modes; the lower center part represents normal frequencies of the ion crystal; the lower right part represents schematic structure of axial normal modes

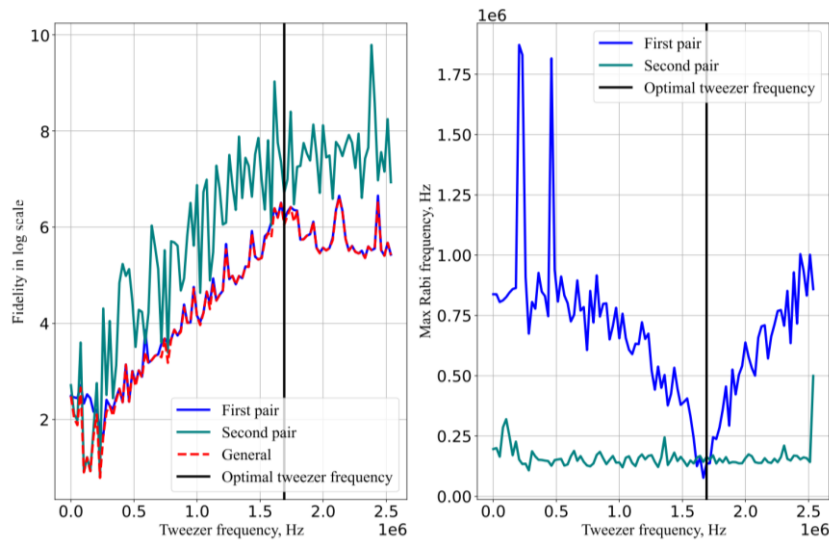


Fig. 2. The left part represents fidelities in log scale for the first (mixed-species) pair, the second (single-species) pair and both pairs combined with respect to the tweezer frequency applied to the second ion; the right part represents maximum values of Rabi frequencies for the first and second pairs with respect to the tweezer frequency applied to the second ion

### References

1. 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(1):012610.
2. Figgatt C. [et al.]. Parallel entangling operations on a universal ion-trap quantum computer// Nature. 2019. V. 572(7769). P. 368–372.

## Влияние мертвого времени ДОФ на скорость генерации секретного ключа в протоколе КРК с НЦУ

А. А. Двуреченский

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящий момент происходит активное развитие квантовых технологий, в том числе и систем квантового распределения ключей шифрования (КРК). Активно развиваются протоколы КРК, которые могут быть легко выстроены в общую сеть, имеющую возможность проводить процесс распределения ключей между всеми узлами напрямую. Примером такого протокола является протокол с недоверенным центральным узлом (НЦУ) [1]. В данной работе рассматривается протокол КРК с НЦУ на фазово-временном кодировании [2]. Одним из факторов, возникающих при практическом рассмотрении данного протокола, является учет конечного мертвого времени детекторов одиночных фотонов (ДОФ). Так как они уходят в режим восстановления на какой-то промежуток времени, это влияет на конечную скорость генерации секретного ключа.

В общем случае анализ влияния мертвого времени ДОФ на скорость выработки секретного ключа (или, что эквивалентно, на величину полезного выхода) следует проводить численно, например, используя метод Монте-Карло. Однако при определенном допущении уменьшение полезного выхода можно сформулировать аналитически. Так, считая, что щелчок хотя бы одного из детекторов приводит к принудительному отключению остальных детекторов (в этом случае говорят о синхронном мертвом времени), то поправка для полезного выхода вводится следующим образом:

$$Q_{\gamma_a \gamma_b}^{B, \tau \neq 0} = \frac{Q_{\gamma_a \gamma_b}^{B, \tau=0}}{1 + \tau R_{\text{tot}}}, \quad (1)$$

где  $B \in \{Z, X\}$  — базис;  $\gamma$  — интенсивность соответствующего отправленного состояния;  $\tau$  — величина мертвого времени;  $R_{\text{tot}}$  — количество срабатываний хотя бы одного ДОФ НЦУ за единицу времени. Величину  $R_{\text{tot}}$  можно оценить как

$$R_{\text{tot}} = f \sum_{\Psi_{ab}} \Pr(n_{\text{click}} \geq 1 | \Psi_{ab}) p(\Psi_{ab}), \quad (2)$$

где  $\Pr(n_{\text{click}} \geq 1 | \Psi_{ab})$  — вероятность того, что «щелкнет» хотя бы один ДОФ при условии, что на НЦУ пришло состояние  $|\Psi_{ab}\rangle = |\psi_a\rangle |\psi_b\rangle$ ;  $p(\Psi_{ab})$  — вероятность того, что отправитель №1 отправил состояние  $|\psi_a\rangle$ , а отправитель №2 — состояние  $|\psi_b\rangle$ ;  $f$  — частота приготовления лазерных импульсов.

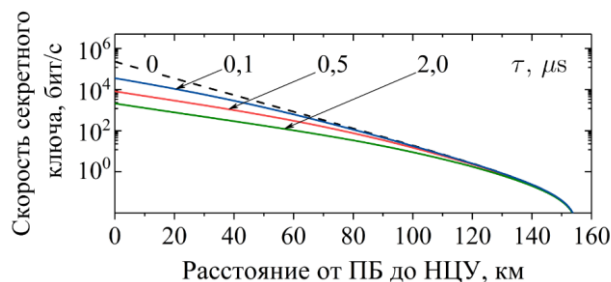


Рис. 1. Зависимость скорости генерации секретного ключа от величины мертвого времени ДОФ  $\tau$

Теоретическая зависимость скорости генерации секретного ключа от величины мертвого времени  $\tau$  показана на рис. 1. Видно, что скорость заметно падает на малых расстояниях при увеличении  $\tau$ . Тем не менее конечное мертвое время не приводит к уменьшению дальности распределения квантового ключа, более того, на расстоянии свыше 120 км между ПБ и НЦУ скорость ключа практически не зависит от мертвого времени.

## Литература

1. *Lo H., Curty M., Qi B.* Measurement-device-independent quantum key distribution//Phys. Rev. Lett. 2012. V. 108(13): 130503.
2. *Tang G.* [et al.]. Time-bin phase-encoding measurement-device-independent quantum key distribution with four single-photon detectors//Chin. Phys. Lett. 2016. V. 33(12): 120301.

УДК 530.145

### Моделирование оптических свойств полупроводниковых микрорезонаторов и фотонных молекул с учетом структурных дефектов и асимметрии параметров

*А. В. Бучинский<sup>1,2</sup>, А. В. Цуканов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Физико-технологический институт им. К. А. Валиева РАН

Для построения квантовых информационных сетей и полномасштабного квантового компьютера необходимо обеспечить когерентное управляемое взаимодействием между системой кубитов. Анализ работ [1, 3] показывает, что такое взаимодействие в большинстве случаев достигается посредством когерентного обмена возбуждением через транспортную фотонную моду. Взаимодействие в гибридных системах между ее узлами сильно зависит от материала, размера и качества изготовления фотонной транспортной структуры [1, 3]. Таким образом, поиск оптимальных конфигураций и параметров фотонных сетей представляет собой актуальную и практически важную задачу.

Взаимодействующие оптические микрорезонаторы (МР), именуемые фотонными молекулами (ФМ), являются важными элементами построения фотонной транспортной структуры [4–6]. Целью настоящей работы является FDTD (Finite-Difference Time Domain) моделирование спектра кольцевого МР с внесенными дефектами, а также FDTD-моделирование распространения ЭМ-волн в ФМ, состоящей из дисковых МР.

Собственные моды кольцевых и дисковых МР с большими азимутальными числами называются модами «шепчущей галереи» (МШГ). Из-за внутреннего отражения на границе резонатора и окружающей среды основная часть МШГ концентрируется в краевой области диска. С математической точки зрения МШГ являются решениями уравнений Максвелла для поперечных электромагнитных волн в цилиндрической системе координат. Для кольцевого МР [2] они имеют вид

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}_k) = \epsilon_0(\mathbf{r}) \frac{\omega_k^2}{c^2} \mathbf{E}_k,$$
$$E_k^{ln} = \begin{cases} A_l J_l(n_1 kr) & r < a - t, \\ B_l J_l(n_2 kr) + C_l Y_l(n_2 kr) & a - t < r < a, \\ C_l Y_l(n_1 kr) & r > a, \end{cases}$$

где  $a$  — внутренний радиус кольцевого МР,  $t$  — толщина волновода,  $n_1$  — показатель преломления окружающей среды,  $n_2$  — показатель преломления материала МР.  $J_l$  и  $Y_l$  являются цилиндрическими функциями Бесселя первого и второго рода, соответственно;  $l$  — азимутальное число. Определяется как число длин волн в азимутальном направлении;  $n$  — радиальное число. Определяется как число максимумов интенсивности в радиальном направлении.

Благодаря высокой концентрации поля МШГ у внешнего края кольцевого микрорезонатора, она эффективно взаимодействует с внешними ЭМ полями. Возникает вопрос: возможно ли сконцентрировать поле моды в определенном угловом секторе краевой области МР? Прорезав в корпусе МР воздушные отверстия (дефекты) на небольшом расстоянии друг от друга (~1 мкм), следует ожидать высокую концентрацию ЭМ-поля МШГ между двумя полостями, так как они образуют «дополнительный» резонатор внутри кольцевого. Результаты FDTD-моделирования подтверждают данное предположение: поле концентрируется между полостями. При увеличении количества полостей добротность МШГ снижается (увеличивается вклад рассеяния на полостях и френелевских потерь). При увеличении диаметра полостей до размера, равному ширине кольца, наблюдается уменьшение интенсивности сконцентрированного между полостями поля. Таким образом, локализация поля МШГ может сопровождаться ухудшением ее рабочих характеристик в зависимости от параметров дефектов.

Исследование гибридизации двух близких по энергии МШГ-мод микродисков из GaAs подробно рассмотрено в статье [4]. Взаимодействие мод МР приводит к формированию «четной» и «нечетной» мод ФМ, которые имеют разные добротности. Результаты эксперимента [4] показывают, что «нечетная» мода имеет большую добротность ( $Q_{\text{odd}} \sim 18000$ ), чем «четная» ( $Q_{\text{even}} \sim 12000$ ). FDTD-моделирование распространения МШГ в гибридной системе из двух GaAs микродисков приводит к следующим результатам:

— при увеличении зазора между двумя микродисками (с 20 нм до 90 нм) спектральное расщепление мод ФМ уменьшается из-за ослабления перекрытия полей МШГ дисков;

— при увеличении относительного показателя преломления микродисков с фиксированным зазором расщепление уменьшается. Величина расщепления мод ФМ зависит не только от величины интеграла перекрытия полей (который в случае фиксированного зазора между дисками не меняется), но и от разности квадратов показателей преломления двух микродисков [3]:

$$\Delta\omega \approx \omega_0 \int [n_r^2(\mathbf{r}) - n_{r,1}^2(\mathbf{r})] \mathbf{E}_1(\mathbf{r}) \mathbf{E}_2(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

### Литература

1. Mouradian S. L., Schröder T. [et al.]. Scalable integration of long-lived quantum memories into a photonic circuit // Phys. Rev. X. 2015. V. 5: 031009.
2. Zhang Z.-H., Shan S.-H. [et al.]. FDTD simulation: refractive index and single-object sensing using a whispering-gallery-modes microring resonator // J. Lightwave Technol. 2018. V. 36(9). P. 1775–1781.
3. Цуканов А. В. Квантовые точки в фотонных молекулах и квантовая информатика. Ч. I // Микроэлектроника. 2013. Т. 42. № 6. С. 403–426.
4. Benyoucef M. [et al.]. Quality-factor enhancement of optical modes mediated by strong coupling in micron-size semiconductor disks // Phys. Status Solidi B. 2012. V. 249(5). P. 925–928.
5. Yariv A. [et al.]. Coupled-resonator optical waveguide: a proposal and analysis // Opt. Lett. 1999. V. 24(11). P. 711–713.
6. Boriskina S. V. Coupling of whispering-gallery modes in size-mismatched microdisk photonic molecules // Opt. Lett. 2007. P. 1557–1559.

УДК 621.373.826

## Анализ стабильности эллиптической поляризации в вертикально-излучающем лазере

Е. А. Дедков<sup>1</sup>, Р. А. Шаховой<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>ООО «КурЭйт», Москва

В работе получены границы асимптотической устойчивости эллиптической поляризации в вертикально-излучающем лазере при наличии анизотропных потерь и двулучепреломления. Анализ проводился на основе широко используемых скоростных уравнений [1] путем применения теоремы Ляпунова об устойчивости по первому приближению.

$$\frac{d}{dt} \tilde{\mathfrak{F}}_+ = \kappa(1+i\alpha)[\mathcal{N} + \mathfrak{n} - 1] \tilde{\mathfrak{F}}_+ - (\gamma_a + i\gamma_p) \tilde{\mathfrak{F}}_-, \quad (1)$$

$$\frac{d}{dt} \tilde{\mathfrak{F}}_- = \kappa(1+i\alpha)[\mathcal{N} - \mathfrak{n} - 1] \tilde{\mathfrak{F}}_- - (\gamma_a + i\gamma_p) \tilde{\mathfrak{F}}_+, \quad (2)$$

$$\frac{d}{dt} \mathcal{N} = \gamma_{\parallel}(\mu - \mathcal{N}) - \gamma_{\parallel} \mathcal{N} (|\tilde{\mathfrak{F}}_+|^2 + |\tilde{\mathfrak{F}}_-|^2) - \gamma_{\parallel} \mathfrak{n} (|\tilde{\mathfrak{F}}_+|^2 - |\tilde{\mathfrak{F}}_-|^2), \quad (3)$$

$$\frac{d}{dt} \mathfrak{n} = -\gamma_a \mathfrak{n} - \gamma_{\parallel} \mathcal{N} (|\tilde{\mathfrak{F}}_+|^2 - |\tilde{\mathfrak{F}}_-|^2) - \gamma_{\parallel} \mathfrak{n} (|\tilde{\mathfrak{F}}_+|^2 + |\tilde{\mathfrak{F}}_-|^2), \quad (4)$$

где  $\tilde{\mathfrak{E}}_{\pm} = \sqrt{\frac{\tau_e}{\tau_{\text{ph}}(N_{\text{th}} - N_{\text{tr}})}} E_{\pm}$ ,  $\mathcal{N} = \frac{N - N_{\text{tr}}}{N_{\text{th}} - N_{\text{tr}}}$ ,  $\mathfrak{n} = \frac{d}{N_{\text{th}} - N_{\text{tr}}}$ ,  $\mu = \frac{\frac{I}{e} \tau_e - N_{\text{tr}}}{N_{\text{th}} - N_{\text{tr}}}$  — нормированные электрические поля ( $E_{\pm}$ ), общее число возбужденных носителей ( $N$ ), разность числа носителей различных спинов

( $d$ ) и ток накачки ( $I$ );  $\kappa = \frac{1}{2\tau_{ph}}$  — скорость затухания поля,  $\alpha$  — фактор Генри,  $\gamma_{||} = \tau_e^{-1}$  — скорость распада возбужденных носителей,  $\gamma_d = \tau_d^{-1}$  — скорость переворота спинов,  $\gamma_a$  — анизотропные потери,  $\gamma_p$  — параметр двулучепреломления.

Вследствие невозможности аналитического решения расчет границы стабильности производился численно. Алгоритм проверки набора параметров на устойчивость состоит из следующих шагов:

1. Подстановка стационарного эллиптического решения:

$$\mathfrak{F}_{\pm}(t) = \sqrt{Q_{\pm}^0} e^{i(\omega t \pm \psi)}, \quad \mathcal{N}(t) = \mathcal{N}^0, \quad \mathbf{n}(t) = \mathbf{n}^0.$$

2. Решение стационарной системы относительно переменных  $Q_{\pm}^0, \omega, \psi, \mathcal{N}^0, \mathbf{n}^0$ .

3. Линеаризация системы (1)–(4), получение характеристического полинома и проверка выполнения условий теоремы Ляпунова об устойчивости по первому приближению посредством критерия Лье-нара–Шипара.

В целях понижения числа необходимых проверок был реализован алгоритм на основе метода бинарного поиска, с помощью которого получены границы устойчивости эллиптической поляризации для различных факторов Генри  $\alpha$  в зависимости от  $\tilde{\mu} = \frac{I}{I_{th}} = \frac{\mu N_{th} - N_{tr}}{N_{th} - N_{tr}}$  и  $\gamma_p$ . Поляризация устойчива под кривыми:

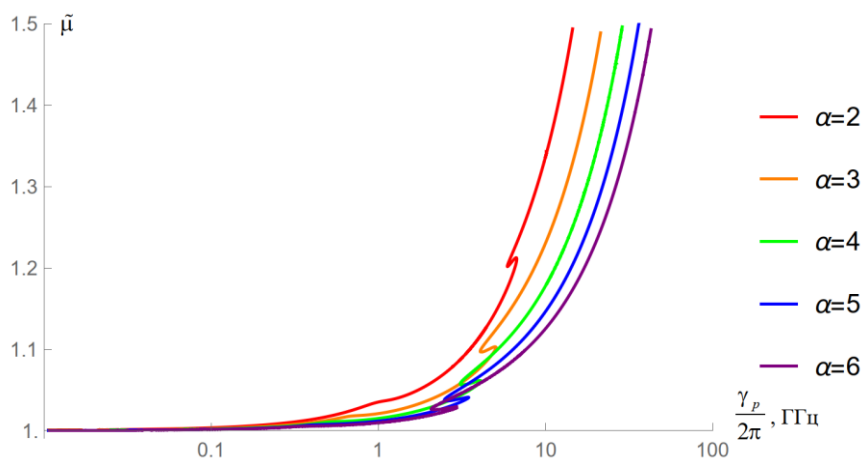


Рис. 1. Границы стабильности эллиптической поляризации для различных  $\alpha$  при  $\kappa = 300$  ГГц,  $\gamma_{||} = 1$  ГГц,  $\gamma_d = 50$  ГГц,  $\gamma_a = -0,1$  ГГц

### Литература

1. *Martin-Regalado J., Prati F., San Miguel M., Abraham N. B.* Polarization properties of vertical-cavity surface-emitting lasers // IEEE J. Quantum Electron. 1997. V. 33(5). P. 768–783.

УДК 535

### Быстрое восстановление частоты следования квантового сигнала со спутника

*А. Н. Чернов<sup>1,2,3,4</sup>, А. В. Хмелев<sup>1,2,3</sup>, В. Л. Курочкин<sup>1,3,4</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Российский квантовый центр

<sup>3</sup>Qspace Technologies

<sup>4</sup>НТИ «Центр квантовых коммуникаций», НИТУ МИСиС

В работе рассмотрен важный аспект временной синхронизации отправленного и принятого сигналов для квантового распределения ключей (КРК) со спутника [1], а именно, восстановление частоты следования зарегистрированных квантовых импульсов. Известно два основных способа временной

синхронизации квантового сигнала: с использованием вспомогательного оптического канала [1, 2] и без его использования, при помощи зарегистрированных квантовых отсчетов [3].

В основу алгоритма быстрого восстановления частоты следования импульсов лег метод поиска периодического сигнала в заданном диапазоне частот, описанный в статье [3]. На основе нулевого приближения и интервала частот, в котором находится искомая частота, выполняются сканирование с шагом, равным желаемой точности. В результате искомая частота будет доставлять максимум функции

$$\text{amp} = \left\| \sum_i^N (\cos \varphi_i, \sin \varphi_i) \right\|, \quad (1)$$

где  $\varphi_i = 2\pi f \cdot t_i$ ,  $t_i$  — время  $i$ -го импульса,  $f$  — некоторая частота,  $\|\dots\|$  — евклидова норма. На рис. 1 приведен характерный результат сканирования частоты, описанным методом.

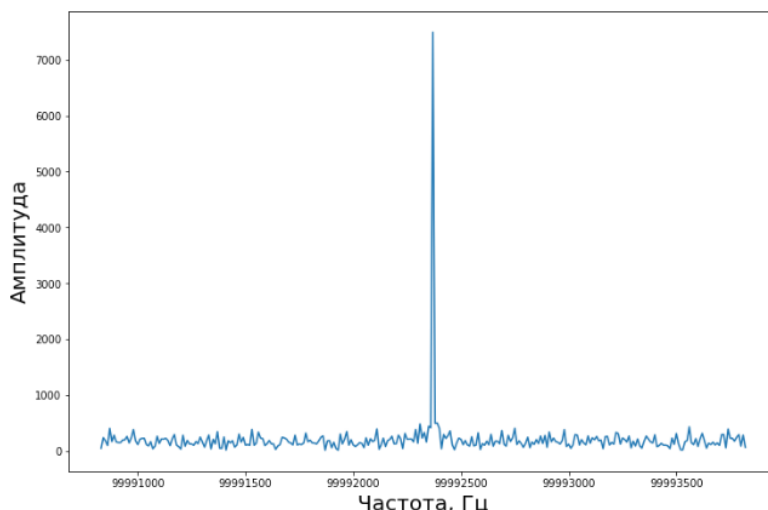


Рис. 1. Результат нахождения частоты следования сигнала для одной секунды смоделированных данных

В ходе сеанса КРК со спутником частота следования сигнала плавно меняется. Основной вклад в это изменение частоты вносят эффект Доплера и нестабильность кварцевых генераторов часов спутника и приемника. Сложность метода поиска частоты линейно зависит от длины интервала сканирования, поэтому компенсация эффекта Доплера позволяет эффективно уменьшить интервал начального сканирования (рис. 2). Так, поправки ко времени прибытия сигнала с использованием GPS-данных о расстоянии между спутником и приемником, вычисляются по формуле

$$\Delta t_j = \frac{L_0 - L_j}{c}, \quad (2)$$

где  $c$  — скорость света,  $L_j$  — высота спутника во время прихода  $j$ -го импульса.

Затем для приведения частоты зарегистрированного квантового сигнала к передаваемой со спутника необходимо компенсировать дрейф частоты, вызванный относительной нестабильностью кварцевых генераторов. С этой целью нами предложен быстрый метод преобразования полученной частоты к исходной  $f = 10^8$  Гц.

Согласно этому методу, времена кликов преобразуются с использованием следующей формулы:

$$\Delta t_i = \int_{t_0}^{t_i} f(t) \left( \frac{1}{f} - \frac{1}{f(t)} \right) dt, \quad (3)$$

где  $\Delta t_i$  — временная добавка ко времени  $i$ -го импульса,  $f(t)$  — зависимость частоты следования сигнала от времени,  $f = \frac{1}{T} = 10^8$  Гц — целевая частота следования сигнала,  $t_i$  — время  $i$ -го импульса.

Проверка метода выполнялась на экспериментальном стенде, состоящем из генератора сигналов (задающего доплеровский дрейф частоты), лазера на длине волны 850 нм, модулятора интенсивности, детектора одиночных фотонов и регистрирующего устройства (определяющего стабильность частоты

записываемого сигнала). Таким образом, предложенный метод позволил восстановить частоту следования квантового сигнала для данных моделирующих КРК со спутником. Точность восстановления сигнала составила  $\sigma = 1,21$  нс (рис. 3).

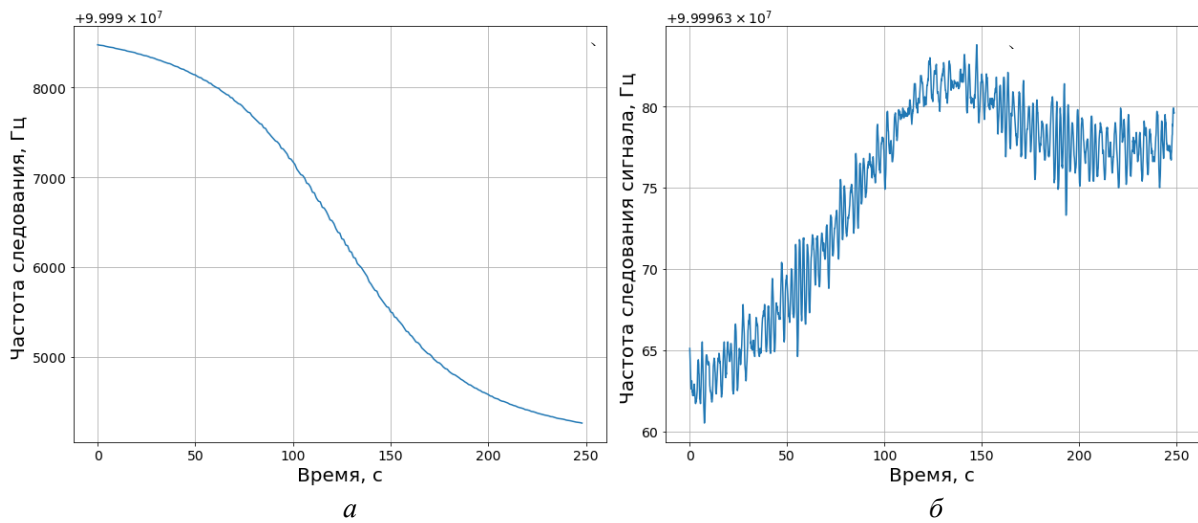


Рис. 2. Полученная частота следования исходного сигнала от времени (а) и частота следования сигнала после компенсации эффекта Доплера (б)

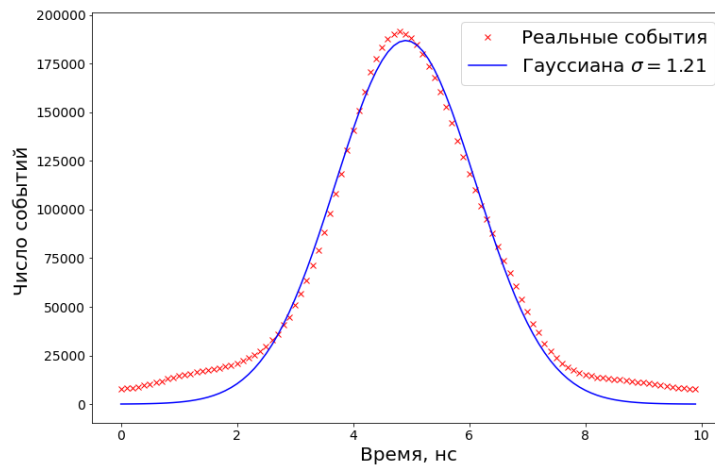


Рис. 3. Временное распределение кликов внутри периода после восстановления частоты следования сигнала, на 200 секундах смоделированного сигнала

### Литература

1. *Liao S.-K., Cai W.-Q., Liu W.-Y.* [et al.]. Satellite-to-ground quantum key distribution // *Nature*. 2017. V. 549(7670). P. 43–47.
2. *Wang C., Li Y., Cai W., Yang M., Liu W., Liao S., Peng C.* Robust aperiodic synchronous scheme for satellite-to-ground quantum key distribution // *Appl. Opt.* 2021. V. 60. P. 4787–4792.
3. *Wang C., Li Y., Cai W., Liu W., Liao S., Peng C.* Synchronization using quantum photons for satellite-to-ground quantum key distribution // *Opt. Express*. 2021. V. 29. P. 29595–29603.



## Реализация безусловного сброса сверхпроводящего кубита в основное состояние

*А. М. Еремеев, Ш. В. Кадырметов, А. Е. Толстобров, Г. П. Федоров, О. В. Астафьев*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Для физической реализации квантовых вычислений необходимо уметь приготавливать кубит в основном состоянии с большой точностью [1]. В самом простом случае это достигается путем ожидания естественной релаксации кубита из-за связи с окружающей средой. Время  $T_1$  (время релаксации кубита) составляет порядка 10 мкс. Поэтому для достижения основного состояния с точностью 0,1% требуется ожидание времени порядка  $t \geq T_1 \ln 10^3 = 69$  мкс. Но данный способ крайне неэффективен. Во-первых, огромная часть эксперимента с кубитом приходится на ожидание прихода кубита в исходное состояние, в то время как манипуляции с кубитом имеют смысл на временах  $t \leq T_1$ . Во-вторых, кубит приходит не в основное состояние, а в термодинамически равновесное при данной температуре образца. В данном равновесии с температурой  $\theta$  ошибка приготовления основного состояния составляет величину порядка  $p_1 \sim \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k\theta}\right)$ , что при характерных значениях  $\frac{\omega}{2\pi} = 6$  ГГц и  $\theta = 100$  мК составляет 0,06.

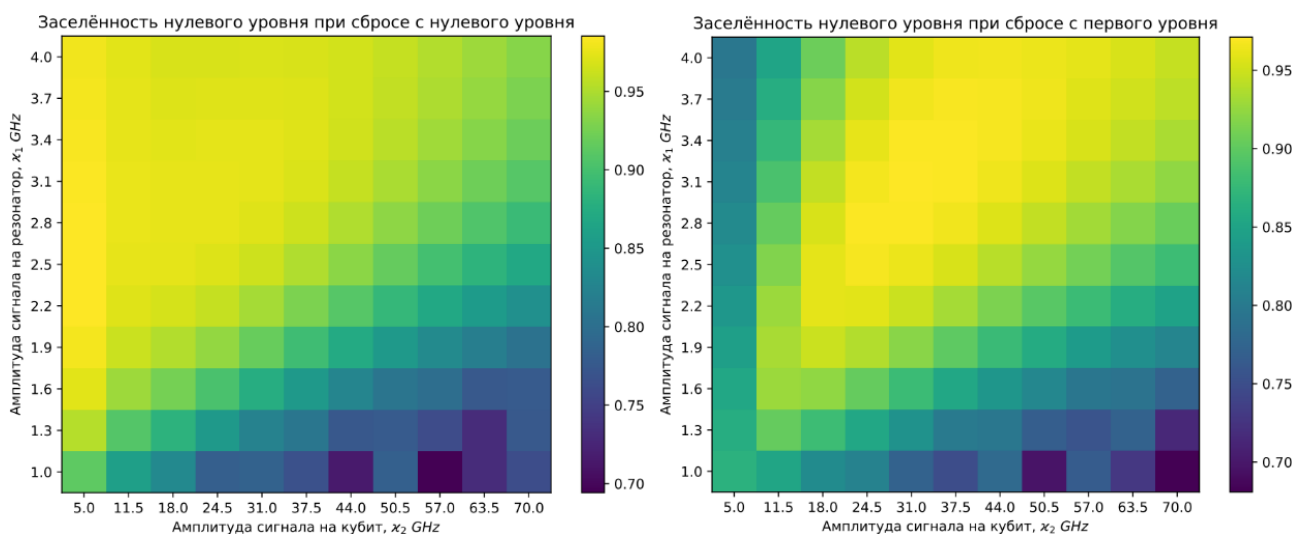


Рис. 1. Результаты симуляции при времени подачи импульсов 3 мкс. На левом графике показана заселенность основного состояния после сброса из основного состояния, на правом — заселенность основного состояния после сброса из первого возбужденного;  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$  — константы связей резонатор-линия и кубит-линия соответственно

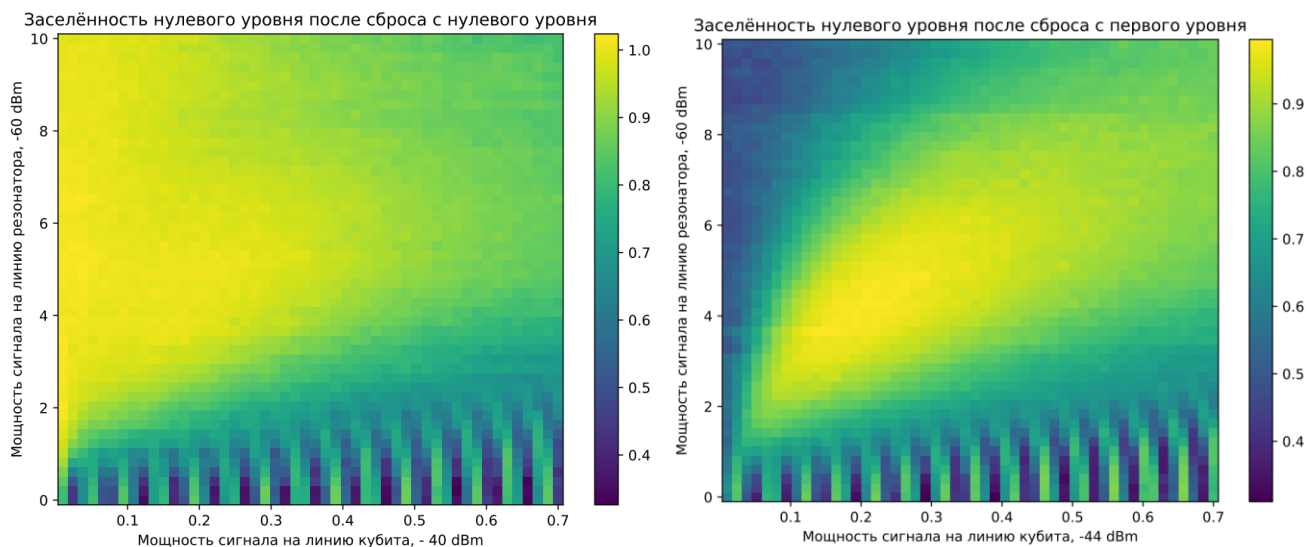


Рис. 2. Результаты эксперимента при времени подачи импульсов 3 мкс. На левом графике показана заселенность основного состояния после сброса из основного состояния, на правом — заселенность основного состояния после сброса из первого возбужденного

Устройство квантового бита может быть различным, но одной из распространенных платформ для их создания являются сверхпроводящие квантовые цепи. В рамках этой технологии одним из самых популярных на данный момент является кубит-трансмон [2].

В данной работе было проведено численное моделирование (рис. 1) и экспериментально реализован (рис. 2) сброс кубита-трансмона, связанного с резонатором, в основное состояние с помощью алгоритма, описанного в статье [3]. Была найдена оптимальная область параметров мощности сигнала, подаваемого на кубит, и мощности сигнала, подаваемого на резонатор, для достижения наилучшей точности. Реализованная процедура сброса может быть внедрена в последующие проведения квантовых вычислений для ускорения работы квантовых алгоритмов.

### Литература

1. *DiVincenzo D. P.* The physical implementation of quantum computation // *Fortschr. Phys.* 2000. V. 48(9–11). P. 771–783.
2. *Koch J.* [et al.]. Charge-insensitive qubit design derived from the Cooper pair box // *Phys. Rev. A.* 2007. V. 76(4):042319.
3. *Geerlings K.* [et al.]. Demonstrating a driven reset protocol for a superconducting qubit // *Phys. Rev. Lett.* 2013. V. 110(12):120501.

UDC 530.145

## On the problem of searching for the optimal embedding of qubits in qudits for realization of a given circuit

*A. S. Nikolaeva*<sup>1,2,3</sup>, *E. O. Kiktenko*<sup>1,3</sup>, *A. K. Fedorov*<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Russian Quantum Center

<sup>2</sup>Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University)

<sup>3</sup>National University of Science and Technology “MISIS”

During the last two years several prototypes of quantum processors based on qudits, d-level quantum systems, were presented. Notably that these prototypes were developed on different physical platforms: trapped ions [1], superconducting systems [2], and photons [3]. Due to their extended computational space compared to qubit-based processors, qudit-based ones provide more resources for solving computational problems. Qudit space is ordinary utilized to simplify multi-qubit gate decompositions by reducing the number of two-particle operations or to minimize the amount of quantum information carriers for the realization of qubit circuits [4]. A qubit circuit can be implemented on a qudit-based processor in a different ways because of this ambiguous use of qudits' space, especially in terms of the amount of two-particle interactions. Reduced circuit implementation fidelity is largely caused by the imperfection of two-particle operations, particularly those carried out when multi-qubit gates are divided into single-particle and two-particle operations. Therefore, finding the most effective approach to compile qubit circuits for qudit-based hardware in terms of the number of two-particle operations becomes a crucial issue.

One of the major obstacles in the process of qubit circuit compilation for the qudit-based hardware is the finding of the efficient way to embed qubits' space in the space of qudits in a such way that the number of two-qudit gates in the qudit-based realization of the input qubit circuit becomes the minimum of all possible. We further refer such embedding of qubits in qudits as an optimal qubit-to-qudit mapping. The finding of such optimal qubit-to-qudit mapping is a non-trivial problem since the number of all possible qubit-to-qudit mappings grows exponentially with the increasing of the number of qubits and qudits in the circuit implementation (see fig. 1).

Several patterns are observed during the finding of the optimal qubit-to-qudit mapping [4]. For example, if two-qubit gate frequently involves the chosen pair of qubits, then it is convenient to embed these two qubits in the space of a separate qudit. In case when it is needed to implement multiqubit gate, it is convenient to embed involved qubits in the qudits with additional levels, which can be used as ancillary states to reduce the number of two-particle gates in the multi-qubit gate decomposition. However, starting with circuits containing more than 10 qubits, it becomes computationally difficult to determine the optimal qubit-to-qudit mapping by brute force through all possible variants [4].

In this work, we propose a method for finding (sub)optimal qubit-to-qudit mapping for the given qubit circuit, number of qudits and their dimension, which are located in all-to-all coupling map in the processor. The complicity of the proposed algorithm is  $O(n^{d'+1})$ , where  $n$  is the number of qubits in the circuit,  $d' = \lceil \log_2 d \rceil$  and  $d$  is the qudit dimension. We note that (sub)optimal qubit-to-qudit mapping is also determined for every given qubit

circuit in a unique way. We expect that the proposed algorithm will simplify the procedure of the (sub)optimal qubit-to-qudit finding during the realization of qubit circuits on the qudit-based hardware.

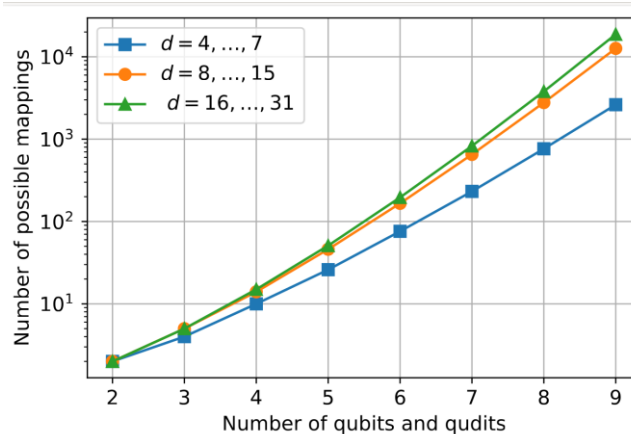


Fig. 1. Number of possible qubit-to-qudit mappings depending on the number of qubits in the circuit. Plotted data are obtained for the case when the number of qubits in the circuit is equal to the number of available qudits in the processor

The research is supported by the Russian Science Foundation (Grant No. 19-71-10091).

### References

1. Ringbauer M., Meth M., Postler L. [et al.]. A universal qudit quantum processor with trapped ions // Nat. Phys. 2022. V. 18. P. 1053–1057.
2. Goss N., Morvan A., Marinelli B. [et al.]. High-fidelity qutrit entangling gates for superconducting circuits // Nat. Commun. 2022. V. 13: 7481.
3. Chi Y., Huang J., Zhang Z. [et al.]. A programmable qudit-based quantum processor // Nat. Commun. 2022. V. 13: 1166.
4. Nikolaeva A. S., Kiktenko E. O., Fedorov A. K. Efficient realization of quantum algorithms with qudits // arXiv preprint. [2021]. arXiv: 2111.04384.

УДК 538.955

## Quantum topological magnetic sensor

A. A. Markov<sup>1,2</sup>, O. N. Kuliashov<sup>1,3</sup>, A. N. Rubtsov<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Russian Quantum Center

<sup>2</sup>Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics

<sup>3</sup>Moscow Institute of Physics and Technology, Department of General and Applied Physics

We propose a concept for a novel type of magnetic field quantum sensor. Our sensor relies on the extreme sensitivity of the electronic density at the boundaries of a Chern insulator in a non-trivial phase to an applied magnetic field. In the bulk of a topologically non-trivial system, the linear density response is proportional to the Chern number of the system [1]. In a finite system of a fixed number of particles, the local version of the Streda formula holds [2]. That is, the density response to a magnetic field is proportional to a localized version of the Chern number, namely the local Chern marker. In this case, boundaries play the role of reservoir for the bulk, so that Streda formula holds in the bulk. This behavior at the boundaries is remarkably non-sensitive to disorder.

To characterize the sensitivity of the proposed sensor we used Fisher information. We show analytically and corroborate numerically that in our sensor Fisher information, associated with the magnetic field, scales as  $L^{3/2}$  where  $L$  is the size of the system. Such scaling surpasses the maximal linear scaling available in classical systems. At the same time, our system does not require the creation and preservation of complex entangled states as other quantum sensors typically do.

We model the sensor as a finite  $N \times N$  sample of a Qia-Wu-Zhang (QWZ) Chern insulator [3]. When the lattice is in a non-trivial topological phase, the Chern marker in the bulk is constant and rapidly declines on the boundary. The sum of the Chern marker over the whole lattice must be preserved, thus Chern marker on the boundary  $C_{\text{boundary}}$  scales as

$$C_{\text{boundary}} \propto A_{\text{bulk}}/A_{\text{boundary}} \propto N^2/N = N,$$

where  $A_{\text{bulk}}(A_{\text{boundary}})$  is the number of sites in the bulk (on the boundary). It was shown in [2], that the local Chern marker is proportional to the change of the local electronic density, as an external uniform magnetic field is applied. Hence, the adiabatic sensitivity of the boundary electronic density scales as  $(dn_e/dB) \propto N$ . The maximal information about the external magnetic field extractable from the measurement of the boundary electronic density is the following Fisher information

$$FI = \sum_{\text{boundary}} (dn_e/dB)^2/n_e \propto A_{\text{boundary}} \times N^2 \propto N^3.$$

Since the size of our system is  $L = N^2$ , we have the  $N^3 = L^{3/2}$  scaling of Fisher information with system size. For lattices' sizes  $10 \times 10 - 20 \times 20$  the least squares approximation gives  $FI \propto N^{3.37}$  because of finite size effects (see Fig. 1).

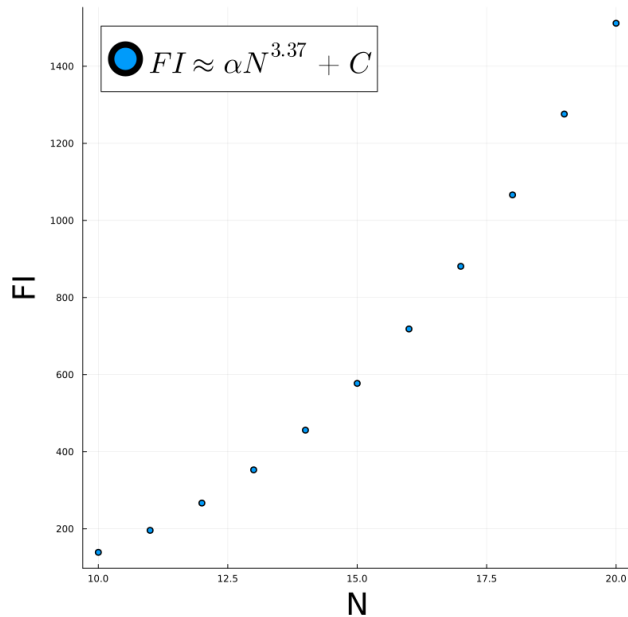


Fig. 1. Dependence of adiabatic Fisher information on the lattice size

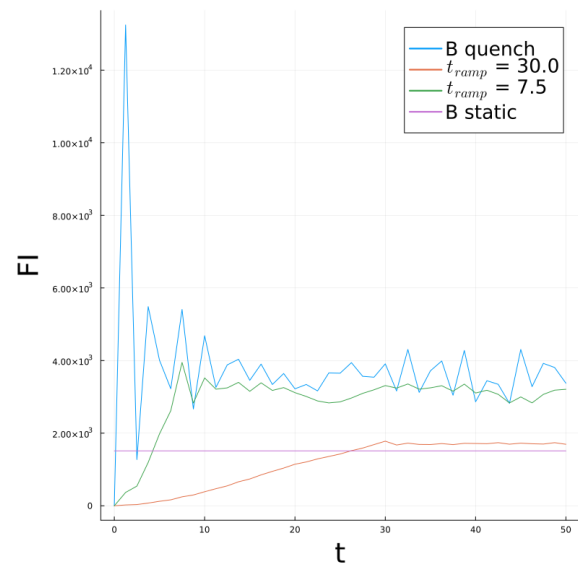


Fig. 2. Dependence of Fisher information on time for different regimes of magnetic field

We use quasiclassical approximation to show that the result also holds for non-adiabatic scenarios. We look at the cases of magnetic field ramps with different rates. In the limiting case, the field is turned on via quench. Moreover, we show that the faster the magnetic field is switched on, the larger the final value of the Fisher information (see Fig. 2). We verify all our results with computer simulations, using the exact diagonalization on lattices of sizes up to  $25 \times 25$ .

## References

1. *Streda P.* Theory of quantised Hall conductivity in two dimensions // J. Phys. C: Solid State Phys. 1982. V. 15(22). P. L717.
2. *Bianco R., Raffaele R.* Orbital magnetization as a local property // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 110(8): 087202.
3. *Qi X., Wu Y., Zhang S.* Topological quantization of the spin Hall effect in two-dimensional paramagnetic semiconductors // Phys. Rev. B. 2006. V. 74(8) 085308.

**Активная стабилизация магнитного поля для экспериментов с холодными атомами***А. Е. Руднев<sup>1,2</sup>, Д. А. Першин<sup>1</sup>, И. А. Пырьх<sup>1,3</sup>, И. Кожокару<sup>1</sup>, А. В. Акимов<sup>1</sup>*<sup>1</sup>Российский квантовый центр<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)<sup>3</sup>МГТУ им. Н. Э. Баумана

Ультрахолодный тулий является перспективным атомом для построения квантового симулятора. Для реализации симуляций необходимы инструменты управления внутренним состоянием атома. В частности, управление магнитными подуровнями основного состояния атома тулия может быть реализовано с помощью радиочастотных пи-импульсов [1]. Однако данные подуровни чувствительны к амплитуде магнитного поля, поэтому шумы магнитного поля негативно сказываются на эффективности радиочастотных переходов. Из работы [2] характерная чувствительность атомов 1 МГц/Гс, при частоте Раби 10 кГц получаем, что шум магнитного поля с амплитудой единицы мГс будет мешать проведению эксперимента.

По измерениям с датчика магнитного поля шум магнитного поля у вакуумной камеры составляет 2–5 мГс. Основным источником шума является магнитное поле, которое осциллирует на частоте 50 Гц и вызвано, по всей видимости, как излучением проводов сетевого тока, так и излучением потребляющих переменный ток приборов. Для устранения влияния шумов магнитного поля ранее была реализована синхронизация установки с частотой электрической сети. Такой подход, однако, ограничивает временное разрешение во время эксперимента. Альтернативой синхронизации по сетевой частоте 50 Гц является компенсация шумов магнитного поля. В данной работе разработана и реализована такая система активной стабилизации магнитного поля вдоль одной оси. Этот способ стабилизации применим при выставлении магнитного поля вдоль оси стабилизации, таким образом шум магнитного поля по другим осям будут вносить малый вклад в величину модуля магнитного поля.

Принцип активной стабилизации основан на измерении шума магнитного поля и создании компенсирующего шум сигнала. Для удобной отладки системы был собран стенд, который повторяет основные геометрические и электрические параметры экспериментальной установки. В частности, была создана копия катушек компенсации лабораторного поля, уже использующихся в установке. Схема стабилизации (рис. 1а) работает по принципу петли с отрицательной обратной связью, состоящей из пропорционально-интегрально-дифференцирующего (ПИД) контроллера SIM960 Stanford Research Systems, феррозондового датчика магнитного поля DRV425 Texas Instruments, пары катушек конфигурации Гельмгольца и источника тока самостоятельной сборки, основанный на идеях работы [3].

Выбор датчика магнитного поля основан на его чувствительности, уровне шума и полосе пропускания. Датчик магнитного поля вносит некоторую задержку в схему стабилизации, что влияет на устойчивость системы (подробнее про устойчивость схем сказано в [4]). Ранее в схеме стабилизации использовался датчик FL1-500 с полосой пропускания 1 кГц, однако его быстродействие ограничило максимальное подавление шума магнитного поля с частотой 50 Гц в 10 раз. Используя датчик DRV425 с полосой пропускания 47 кГц, получилось ослабить шум магнитного поля с частотой 50 Гц в 28 раз.

В работе схемы необходимо стабилизировать магнитное поле у атомов, используя датчик магнитного поля на некотором расстоянии от них. В силу геометрии вакуумной камеры датчик нельзя поставить к атомам ближе 10 см; на стенде выяснилось, что существующая конфигурация катушек не обеспечивает однородность магнитного поля на таких расстояниях. Из-за принципа работы ПИД контроллера магнитное поле у атомов можно стабилизировать, только если поле от катушек у атомов и у датчика одинаково.

На стенде была собрана схема, изображенная на рис. 1б). Дополнительный независимый датчик был помещен в центре между катушками на месте атомов, на осциллографе наблюдался спектр магнитного поля. Датчик в петле обратной связи помещался в 11 см по оси  $X$  от независимого датчика. Была снята зависимость ослабления спектральной плотности шума магнитного поля на частоте 50 Гц на спектре с независимого датчика в зависимости от положения вдоль оси  $Y$  датчика в обратной связи. Из графика на рис. 2 видно, что максимальное ослабление спектральной плотности достигается в двух областях и составляет 26–29 дБ. Положения данных областей отличается от рассчитанных на 1,5 см, что может быть связано с погрешностью измерения геометрии катушек и наличием неучтенных магнитных материалов. Таким образом была показана возможность стабилизации магнитного поля при неоднородном магнитном поле от катушек.

В данной работе на макете экспериментальной установки была реализована система стабилизации магнитного поля, которая ослабила внешний шум магнитного поля на частоте 50 Гц в 28 раз, с 4 мГс до

140 мкГс. Данного значения должно хватить для проведения экспериментов с магниточувствительными переходами. На данный момент происходит интеграция схемы стабилизации в экспериментальную установку.

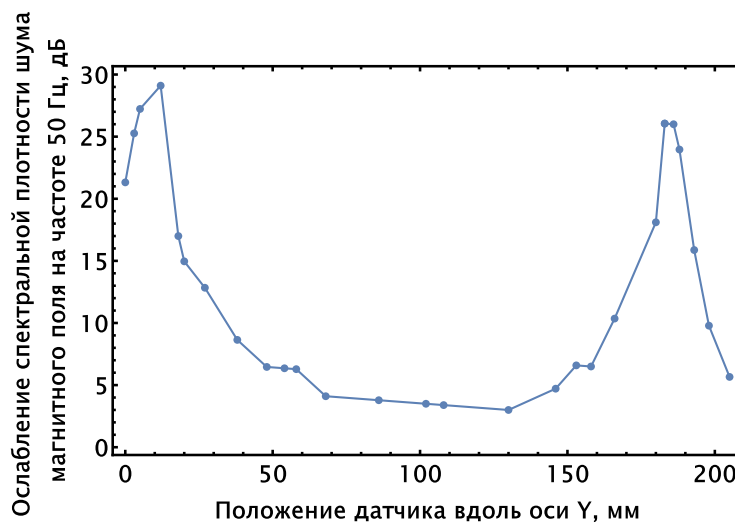
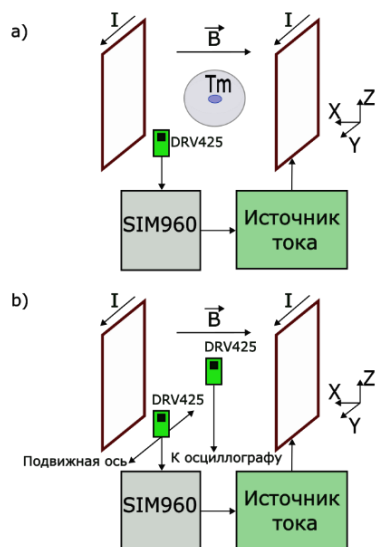


Рис. 1. Схема стабилизации магнитного поля для ультрахолодных атомов тулия (а); схема макета экспериментальной установки (b).  $\vec{B}$  — магнитное поле от катушки,  $I$  — направление тока в катушках

Рис. 2. Зависимость ослабления спектральной плотности шума магнитного поля на частоте 50 Гц на независимом датчике в зависимости от положения датчика в обратной связи по оси  $Y$

### Литература

1. *Pershin D. A.* [et al.]. Microwave coherent spectroscopy of ultracold Thulium atoms // *Phys. Rev. A.* 2020. V. 102: 043114.
2. *Першин Д. А.* [и др.]. Микроволновая спектроскопия ультрахолодных атомов тулия // *Краткие сообщения по физике ФИАН.* 2018. № 12. С. 9–14.
3. *Dobosz J.* [et al.]. Bidirectional, analog current source benchmarked with gray molasses-assisted stray magnetic field compensation // *Appl. Sci.* 2021. V. 11: 10474.
4. *Дорф Р., Бишоп Р.* Современные системы управления: пер. с англ. — М.: ЛБЗ, 2002.

UDC: 53.06

### Simulation of ion dynamics in Surface Electrode Trap

*A. Podlesnyy<sup>1,2</sup>, Y. Suleimen<sup>1,2</sup>, L. A. Akopyan<sup>2</sup>, N. Sterligov<sup>2</sup>, O. Lakhmanskaya<sup>2</sup>, K. Lakhmanskiy<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Moscow Institute of Physics and Technology

<sup>2</sup>Russian Quantum Center

Trapped ions are one of the leading technology platforms for large-scale Quantum Computing (QC). However, practical realizations of QC require the ability to increase the number of simultaneously trapped ions while maintaining the ability to control and measure them individually with high fidelity. For single linear arrays of ions, the speed and performance of two-qubit gates generally decreases as the total number of ions grows. A promising approach around these issues is to break a single long ion chain into segments. Each such a segment or module can trap a restricted number of ions to maintain high fidelity and high-speed operations. The challenge, then, becomes how to move quantum information between the modules. The coupling between the ions in separated segments can be achieved in different ways: through transport, through effective spin-spin interactions, shared electrically floating electrode or controlled orientation of the secular modes. Here we focus on the alternative method: the exchange of the phonons between separate wells. Proof-of-principle investigations demonstrated its efficiency for two trapping regions. In this paper<sup>1</sup> we offer a new surface trap design capable of coupling the ion motion in the selected wells among ten by adjusting the DC-voltages on a set of electrodes (see Fig. 1).

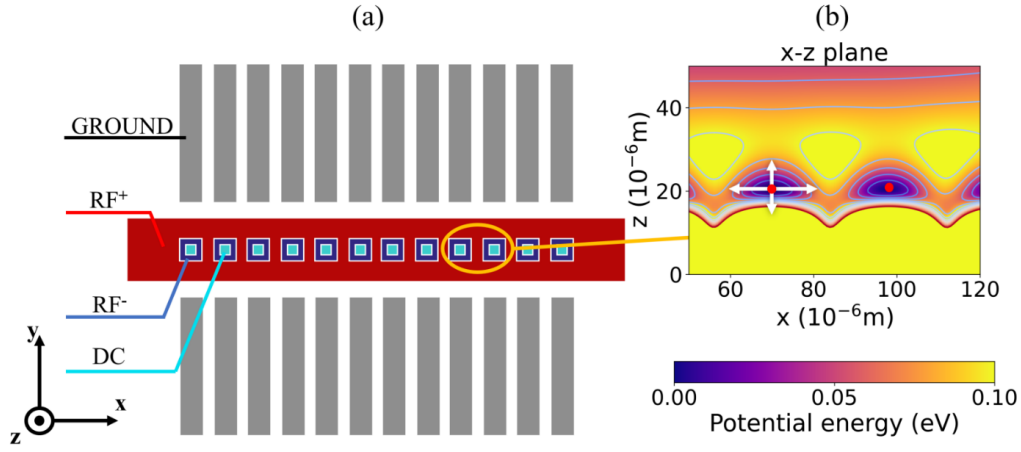


Fig. 1. A surface ion trap geometry, used for simulations in the paper. The trap forms 12 distinct trapping potential wells. Ion confinement with predetermined height is achieved by the single red RF<sup>+</sup> electrode and 12 dark-blue RF out-of-phase electrodes. 12 light-blue DC electrodes in the middle of squares are utilized for secular frequency optimization. The side DC electrodes, depicted in gray, are essential for stray field compensation (a).

Potential distribution above two individual traps. This design has a trap depth of 60–100 meV in the authorized DC voltage range. The principal axes of oscillation are illustrated by white arrows (b)

We account the possible issues related to anomalous heating rate typical for such traps and determine the optimum range of voltages and frequencies to negotiate this effect. Namely, we demonstrate and characterize a variety of phonon mode spectra for different voltage sets for 10 ion-architecture for two types of ions: Ca and Be. We found that it is possible to unite the ions into segments with unique phonon mode frequencies to perform parallel MS-gate operations (see Fig. 2a–b). We also model the fidelity of the MS-gate operation for a segment comprised of two ions accounting the two main contributions to the gate infidelity: the limited frequency difference between phonon frequencies of the segments and the finite drift of the phonon frequencies expected in experiment (see Fig. 2c–d).

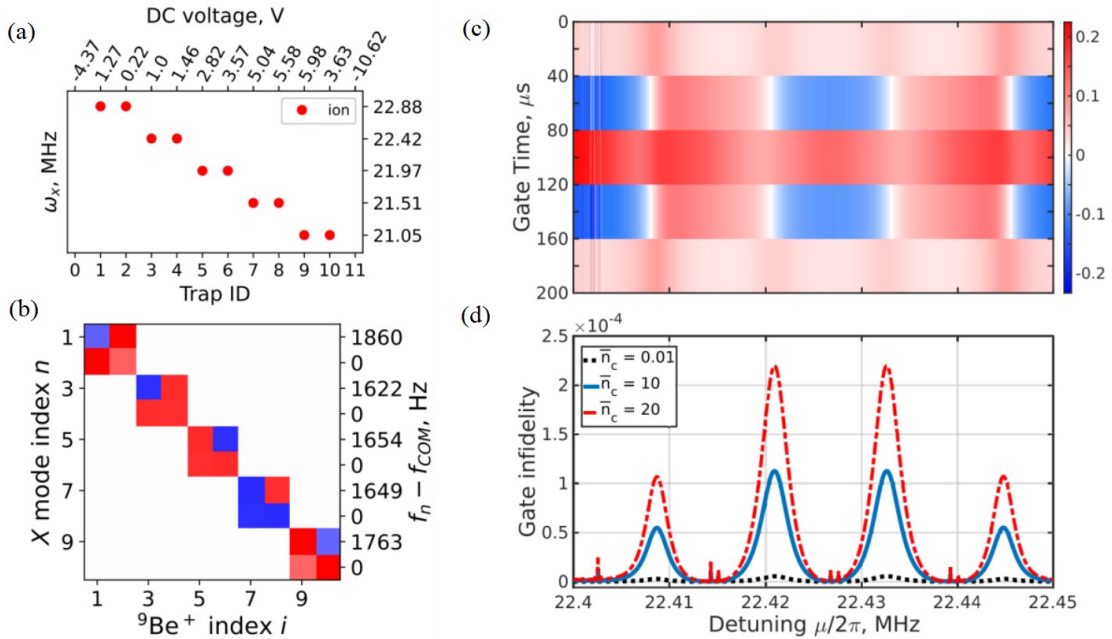


Fig. 2. A secular frequency spectrum of single ions depending on the trap ID. The top x axis shows required DC voltages on the central electrodes. The 0 and 11 traps are used as endcap voltages to decrease the required voltage in trapping sites (a). A normal mode interaction matrix of <sup>9</sup>Be<sup>+</sup> ion crystal in the presented voltage set configuration. The right y axis represents the difference between COM modes (0) and stretch mode of each ion pair. The mean frequency separation  $df = 1,7$  kHz (b). In-time segmented Rabi frequency in MHz for two neighboring <sup>9</sup>Be<sup>+</sup> ions, providing the highest fidelity of an MS-gate (c). MS-gate infidelity over detuning  $\mu$  for two neighboring <sup>9</sup>Be<sup>+</sup> ions for different initial average normal mode occupations. The initial average occupation for ion pair center-of-mass mode is specified in the legend. The drift rates for all the modes are taken as 1 MHz/min. Rabi frequency instabilities coincide with gate infidelity local maxima (d)

MS-gate operation for the segmented ion chains. We maximize the fidelity of the gates by dividing the time of the MS-gate pulse into 5 intervals. The infidelity of the gate was calculated under the drift of the normal mode frequencies expected in experiment and for different initial normal mode temperatures. We show that for experimental drift rates of few kHz per several minutes the infidelity from the normal frequencies drift does not exceed  $5 \cdot 10^{-6}$  if the detuning is not in the resonance with normal mode frequencies of the ion pair. For higher drift rates the ion-to-mode entanglement starts to play an important role. Namely, we obtained the fidelity of the gate of 99.97% for a drift rate of 1 MHz/min and initial average COM mode occupation number 20. Additionally, we investigate how the number of ions per individual trap and anharmonic potential terms affect the coupling between the two wells. Storing two Be ions per trap enhance the coupling strength by a factor of 2.11. However, anharmonic shifts of secular frequencies decouple individual wells.

Overall, the proposed design can indeed become a powerful tool to connect distant surface traps. Here we mostly focused on the gate-based approach of quantum computation. But in general, the trap can be also utilized for quantum simulations. We are expecting the proposed design to be competitive with the present scaling methods in respect of achieving large-scale QC.

## References

1. Podlesnyy A., Suleimen Y., Akopyan L. A., Lakhmanskaya O., Lakhmanskiy K. Parallel coupling of trapped ions in multiple individual wells // arXiv preprint. [2022]. arXiv: 2211.07121.

UDC 538.941

## Superfluid transition in quasi-two-dimensional disordered dipolar Fermi gases

V. Y. Pinchenkova<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Moscow Institute of Physics and Technology

<sup>2</sup>Russian Quantum Center

The study of ultracold atomic Fermi gases became a rapidly growing domain of theoretical and experimental research. One of the important questions here is the interplay between interaction and disorder. As was pointed out in the recent work [1], the weak disorder can have a significant effect on the superfluid transition temperature for two-dimensional (2D) dipolar weakly interacting fermions. In this work, we investigate the effect of weak disorder on quasi-2D Fermi gases ranging from the weakly to strongly interacting regime. We consider two-component ultracold dipolar fermions (magnetic atoms or polar molecules) with dipoles perpendicular to the plane of their translational motion and confine ourselves to the case of fermion-fermion attraction. We explore the Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT) superfluid transition in such systems relying on the mean-field Leggett approach [2] and treating the disorder effects in the framework of the theory of Abrikosov and Gor’kov [3]. According to these methods, equations for the BKT transition temperature  $T_{\text{BKT}}$  in a weak disorder (such that  $k_F l \gg 1$ , where  $k_F$  is the Fermi momentum, and  $l$  is the mean free path) are given by

$$\Delta(\mathbf{k}) = -T \sum_{\omega_j} \int \frac{d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^2} V(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \bar{F}(\mathbf{k}', \omega_j), \quad (1)$$

$$n = 2T \sum_{\omega_j} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \bar{G}(\mathbf{k}, \omega_j) e^{i\omega_j \varepsilon} \Big|_{\varepsilon \rightarrow +0}, \quad (2)$$

$$n_s(T) = \frac{2}{m} T \sum_{\omega_j} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} k^2 |\bar{F}(\mathbf{k}, \omega_j)|^2, \quad (3)$$

where  $\Delta(\mathbf{k})$  is the superfluid gap,  $\omega_j = \pi T(2j + 1)$ ,  $j = 0, \pm 1, \dots$  are the fermion Matsubara frequencies,  $n$  is the particle density,  $n_s$  is the superfluid density,  $V(\mathbf{k})$  is the Fourier transform of the effectively 2D interaction potential,  $m$  is the particle mass, and we put  $\hbar = 1$ . At ultralow energies, we confine ourselves to s-wave scattering and, hence,  $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta(k)$ . The normal and anomalous finite-temperature Green functions averaged over the disorder  $\bar{G}(\mathbf{k}, \omega_j)$  and  $\bar{F}(\mathbf{k}, \omega_j)$ , are given by

$$\bar{G}(\mathbf{k}, \omega_j) = -\frac{i\tilde{\omega}_j + \tilde{\xi}_k}{\tilde{\omega}_j^2 + \tilde{\xi}_k^2 + \tilde{\Delta}_k^2}, \quad (4)$$

$$\bar{F}(\mathbf{k}, \omega_j) = \frac{\tilde{\Delta}_k}{\tilde{\omega}_j^2 + \tilde{\xi}_k^2 + \tilde{\Delta}_k^2}, \quad (5)$$



where  $\xi_k = \frac{k^2}{2m} - \mu$ ,  $\mu$  is the chemical potential,  $\tilde{\omega}_j$  and  $\tilde{\Delta}_k$  are related to the Matsubara frequency  $\omega_j$  and the gap  $\Delta(k)$  as

$$\tilde{\omega}_j = \omega_j \left( 1 + \frac{1}{2\tau \sqrt{\omega_j^2 + \Delta^2}} \right), \quad (6)$$

$$\tilde{\Delta}_k = \Delta(k) + \frac{\Delta}{2\tau \sqrt{\omega_j^2 + \Delta^2}}, \quad (7)$$

with  $\Delta = \Delta(k_F)$ , and  $\tau$  being the time between disorder-induced elastic collisions in the Born approximation. We assume that the interaction is weak if  $\lambda = \frac{|f(k_F, k_F)|m}{2\pi} \ll 1$ , and the interaction is strong if  $\lambda \sim 1$ , where  $f(k, k')$  is the quasi-2D s-wave fermion-fermion scattering amplitude.

Complementing Eqs. (1)–(3) with the Nelson–Kosterlitz relation  $n_s = 8mT_{\text{BKT}}/\pi$  we obtain self-consistent equations for  $T_{\text{BKT}}$ . We have solved them numerically for  $k_F l = 20$ ,  $k_F r_* = 0.1$  and different values of  $k_F l_0 \ll 1$ , where  $r_*$  is the so-called dipole-dipole distance,  $l_0 = \sqrt{1/m\omega_0}$  is the harmonic oscillator length, and  $\omega_0$  is the confinement frequency. Fig. 1 shows the ratio of the BKT transition temperature in the presence of disorder to that temperature in the clean case  $T_{\text{BKT}}/T_{\text{BKT}}^0$  versus  $\lambda$ . In the limit  $\lambda \ll 1$  and in the case of the strong confinement (such that  $k_F l_0 = 0.01$ ), the interplay between the dipole-dipole interaction and the weak disorder leads to a significant increase of  $T_{\text{BKT}}$  like in the purely 2D case [1]. For weaker confinement, the effect of the disorder becomes smaller but is still significant. With an increase in the interaction strength, the influence of weak disorder on  $T_{\text{BKT}}$  decreases and practically vanishes in the strongly interacting regime even in the case of the strong confinement.

This work was done in collaboration with G. V. Shlyapnikov, V. I. Yudson and S. I. Matveenko. This work was supported by the Russian Science Foundation Grant No. 20-42-05002.

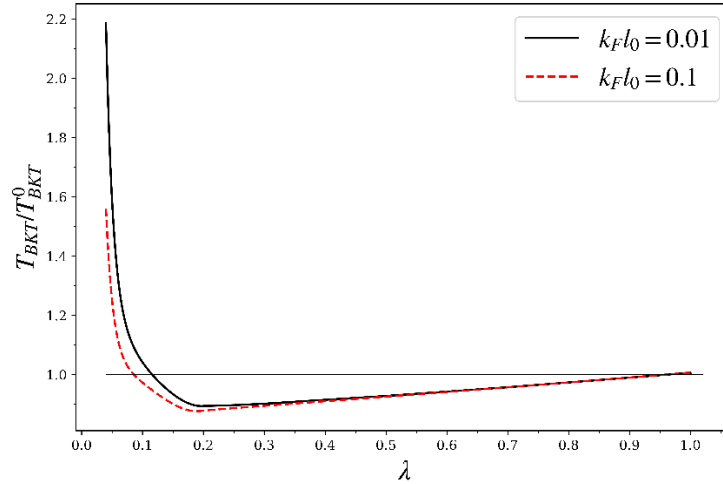


Fig. 1. The disorder-induced change of the BKT temperature  $T_{\text{BKT}}$  versus  $\lambda$  with  $T_{\text{BKT}}^0$  being the BKT temperature in the absence of disorder.  $k_F l = 20$ , and  $k_F r_* = 0.1$

## References

1. *Matveenko S.I., Yudson V.I., Altshuler B.L., Shlyapnikov G.V.* Superfluid transition in disordered dipolar Fermi gases // *Phys. Rev. A.* 2020. V. 102: 053319.
2. *Leggett A.J.* Cooper pairing in spin-polarized Fermi systems // *Le Journal de Physique Colloques.* 1980. V. 41(C7). P. 19–26.
3. *Abrikosov A., Gor'kov L.P.* On the theory of superconducting alloys. I. The electrodynamics of alloys at absolute zero // *Sov. Phys. JETP.* 1959. V. 35(8). No. 6. P. 1090–1098.

## Adiabatic Gauge Potential and quasi-integrability of Heisenberg chain

*P. Orlov<sup>1,2</sup>, D. Kurlov<sup>2,3,4</sup>*

<sup>1</sup>Moscow Institute of Physics and Technology

<sup>2</sup>Russian Quantum Center, Moscow

<sup>3</sup>Department of Physics, University of Basel

<sup>4</sup>National University of Science and Technology “MISIS”

Integrable models in quantum mechanics are characterized by an extensive amount of integrals of motion — operators that commute with the Hamiltonian of the system. However, if one adds a perturbation of a general type, then integrability structure passes away. In addition, for large enough coupling constant quantum chaos occurs. Such perturbations are called integrability-breaking. On the opposite site, there are integrability-preserving perturbations, for which integrals of motion are deformed, but do not disappear. It turns out that described above perturbations type classification is not complete. In addition, there are perturbations, which are called quasi-integrable. In such a case, initial integrals of motion can be deformed to quasiconserved charges — operators that almost commute (instead of complete commutativity in integrable model). Our work is devoted to study of quasi-integrability phenomenon on the example of the perturbed Heisenberg spin chain.

In work [1] it was conjectured that Heisenberg spin chain with next nearest neighbor interaction possesses an infinite tower of quasiconserved charges. The first few of them were constructed explicitly. However, there was no complete description of such charges.

Firstly, we examine this conjecture using Adiabatic Gauge Potential (AGP) — operator that describes how eigenvectors are deformed under the perturbation. It was shown that AGP norm is sensitive to perturbation type [2]. Namely, for integrability-preserving perturbations AGP norm can be bounded polynomially with the system size, while for integrability-breaking perturbations AGP norm scales exponentially. We find that for the perturbed Heisenberg chain the behavior of the AGP norm corresponds to neither an integrability-preserving nor an integrability-breaking regime, which supports the conjectured quasi-integrability of the model (see Fig. 1).

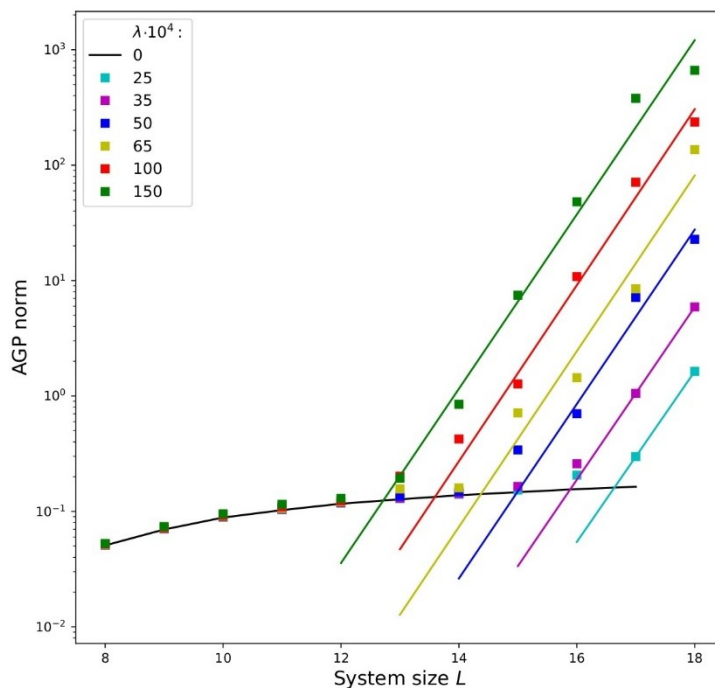


Fig. 1. AGP norm for Heisenberg model with NNN interaction

Secondly, we explicitly construct the infinite set of quasi-conserved charges. Therefore, prove the conjecture. The idea of the method behind the construction is the following. Using the so-called long-range integrable deformations [3], one can define their truncation. Such truncation will be nothing but quasi-integrable model. We found out that Heisenberg model with NNN interaction is merely such a truncation. Also, this method allows to construct other quasi-integrable models, which can be a useful tool to study them.

## References

1. *Kurlov D.* [et al.]. Quasiconserved quantities in the perturbed spin-1/2 XXX model // Phys. Rev. B. 2022. V. 105: 104302.
2. *Pandey M.* [et al.]. Adiabatic eigenstate deformations as a sensitive probe for quantum chaos // Phys. Rev. X. 2020. V. 10: 041017.
3. *Bargheer T.* [et al.]. Long-range deformations for integrable spin chains // J. Phys. A: Math. Theor. 2009. V. 42: 285205.

UDC 538.958

## Symmetry breaking in a ring-shaped spinor polariton condensates

***K. E. Kondratenko<sup>1,3</sup>, I. Yu. Chestnov<sup>2</sup>, S. S. Demirchyan<sup>3</sup>, A. V. Kavokin<sup>1,2</sup>***

<sup>1</sup>Moscow Institute of Physics and Technology (MIPT)

<sup>2</sup>ITMO University

<sup>3</sup>International center for Quantum Optics and Quantum Technologies (The Russian Quantum Center)

The paper considers stationary solutions of the Gross–Pitaevskii equation for a quasi-one-dimensional two-component condensate of exciton polaritons in a ring geometry:

$$\mu\Psi_{\pm} = -\frac{d^2\Psi_{\pm}}{d\varphi^2} + 2\pi V_0\delta(\varphi)\Psi_{\pm} + gN|\Psi_{\pm}|^2\Psi_{\pm} + \Delta e^{\mp 2i\varphi}\Psi_{\mp} \frac{n!}{r!(n-r)!}, \quad (1)$$

here  $\Psi_{\pm}$  — describe the circularly polarized components of the polariton condensate, normalized so that  $\int(|\Psi_+|^2 + |\Psi_-|^2)d\varphi = 1$ ,  $\mu$  — chemical potential,  $V_0 > 0$  — delta barrier strength,  $gN > 0$  — repulsive non-linearity,  $\Delta$  — value of TE-TM splitting. The Hamiltonian of such a TE-TM splitting was studied in the papers [1, 2]. All energy quantities are dimensionless to the energy of the quantum rotator  $\hbar^2/2m_{\text{pol}}R^2$ , where  $\hbar$  — Planck constant,  $m_{\text{pol}}$  — mass of polariton,  $R$  — ring radius.

In the limit  $V_0, \Delta \ll 1$  the solution of the system can be described by a four-wave model:

$$\Psi_{\pm} = A_{\pm}e^{+i\varphi} + B_{\pm}e^{-i\varphi}. \quad (2)$$

The linear part of equations (1) is invariant with respect to the permutation of the polarization components and the specular reflection of the system with respect to the position of the  $\varphi \rightarrow -\varphi$ . Therefore, linear states corresponding to the same symmetry have equal populations of circular polarizations and zero angular momentum. In the nonlinear case, these solutions are transformed, but preserve the same symmetry. However, at a certain critical strength of the nonlinear interaction, there are solutions with broken symmetry. We characterize the degree of symmetry breaking by two parameters: the average orbital momentum  $\langle L_z \rangle$  and the average degree of circular polarization  $\langle S_z \rangle$ .

Fig. 1 shows the scenarios of breaking the symmetry with the parameters  $V_0 = 0.05$ ,  $\Delta = 0.25$ . The numerical solution of the complete two-component Gross–Pitaevskii equation (1) (solid lines), as well as the simplified model with ansatz (2) (dashed lines) was performed using the modified Newton–Raphson algorithm [3].

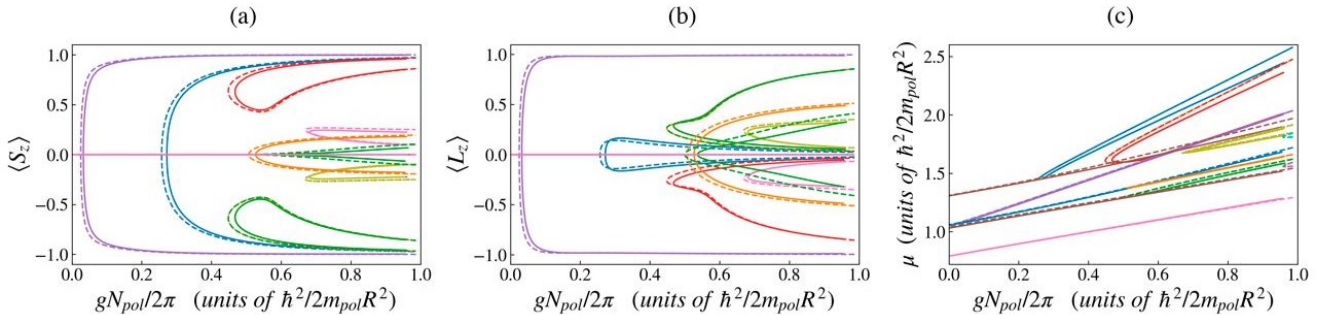


Fig. 1. Scenarios of symmetry breaking in the simplified and full models,  $V_0 = 0.05, \Delta = 0.25$

Within the framework of the simplified model (2), one can estimate the critical nonlinearity corresponding to the appearance of the first state with broken symmetry. In the limit of a weak TE-TM splitting  $\Delta \ll V_0$  a state with vanishingly small angular momentum  $\langle L_z \rangle \approx 0$  and a dominant circular polarization of the condensate  $\langle S_z \rangle \rightarrow \pm 1$  arises at:

$$(gN)_{\text{crit}} = 4\pi\Delta/3. \quad (3)$$

Similarly, in the limit of a weak barrier  $V_0 \ll \Delta$ , one can predict the appearance of circularly polarized states  $\langle S_z \rangle \rightarrow \pm 1$  rotating clockwise and counter-clockwise  $\langle L_z \rangle \rightarrow \pm 1$ . The analytical estimation for the critical nonlinearity gives:

$$(gN)_{\text{crit}} = 2\pi\left(\sqrt{\Delta^2 + 4V_0^2} - \Delta\right). \quad (4)$$

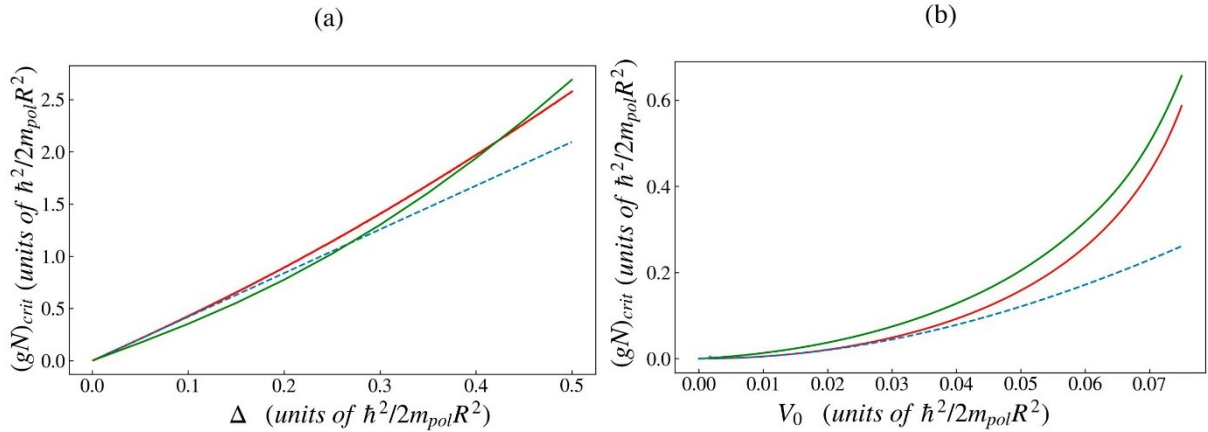


Fig. 2. Critical nonlinearity of the first state with broken symmetry  $V_0 = 0.25$  (a);  $\Delta = 0.25$  (b)

Fig. 2 shows a comparison of estimates (3), (4) (dashed blue line), simplified model (2) (red line) and full model (1) (green) for critical nonlinearity. Thus, when either  $\Delta \ll V_0 \ll 1$  or  $V_0 \ll \Delta \ll 1$  analytical estimation (3), (4) and simplified model (2) the full model (1).

## References

1. *Kozin V. K.* [et al.]. Topological metamaterials based on polariton rings // *Phys. Rev. B.* 2018. V. 98(12): 125115.
2. *Gulevich D. R.* [et al.]. Topological spin Meissner effect in spinor exciton-polariton condensate: Constant amplitude solutions, half-vortices, and symmetry breaking // *Phys. Rev. B.* 2016. V. 94(11): 115407.
3. *Kuznetsov Y. A., Kuznetsov I. A., Kuznetsov Y.* Elements of applied bifurcation theory. — New York: Springer, 1998.

UDC 530.145.7

## Subcycle single-qubit quantum gates — an analytical approach

*A. Chuchalin, A. S. Moskalenko*

<sup>1</sup>Department of Physics, KAIST, Daejeon 34141, Republic of Korea

Avoiding decoherence is a key issue for quantum computing. Ultrafast single-qubit gates, aiming to mitigate this issue, have been demonstrated for various physical platforms. However, they typically still remain slow on a subcycle timescale, i.e., on a time scale shorter than the characteristic timescale of the driven system itself, determined by the inverse of the transition frequency between the involved states. In order to develop quantum gates operating on subcycle timescales, we investigate driving by light pulses having durations on such timescales. We find the resulting transformations analytically by applying a unitary perturbation theory. We identify the corresponding effective rotation as a functional of a given pulse, specifying operations allowed within a subcycle driving scheme.

Errors in quantum computing can occur due to the decoherence of the utilized states. One way to reduce such errors is to use quantum gates with sufficiently short operation times, compared to the timescale on which the decoherence takes place. Experimental realization of ultrafast single-qubit gates has been demonstrated with several physical systems constituting the qubit operational space (cf., e.g., Ref. 2-4). Alternatively, an ultrafast driving can be implemented involving additional states outside of the operational space. However, the dynamics for such schemes has to be adiabatic and still remains slow with respect to subcycle timescales [5], i.e., timescales being shorter than the inverse of the transition frequency between the relevant states constituting the qubit space [1].

In this study, we find analytical expressions for single-qubit gates that can be realized by arbitrary ultrashort pulses with durations on subcycle timescales. For that, a unitary perturbation theory has been applied, where the expansion in terms of a small pulse duration takes place inside the exponent of the time-evolution operator [1]. This approximation can be generalized also to the strong-field regime, providing analytical expressions for the time evolution induced by short and strong pulses. From the obtained expressions, we identify a set of possible quantum gates operating on subcycle timescales.

For describing a qubit interacting with classical light, we consider a two-level system within the dipole approximation. The Hamiltonian is given as:

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \hat{\sigma}_3 - f(t) \hbar \Omega \hat{\sigma}_1,$$

where  $\omega_0$  is the transition frequency between the two levels of the system,  $f(t)$  is the temporal profile of the driving pulse with duration  $\tau_d$ , and  $\Omega$  is the Rabi frequency. Subcycle driving implies  $\tau_d \ll 1/\omega_0$ .

Every unitary operation on a state of the system corresponds to a rotation of the Bloch vector about a specific axis of rotation  $\mathbf{n}$  by an angle  $\theta$ . In order to get analytical expressions for  $\mathbf{n}$  and  $\theta$  for a quantum gate induced by an ultrashort pulse, the exponent of the time-evolution operator  $\hat{U}$  in the interaction picture at the pulse center,  $t = t_1$ , is expanded perturbatively [1]. Specifically, we search  $\hat{U}_n$  for  $n \in \{1, 2, \dots\}$  such that  $\hat{U} \simeq \hat{U}_1 \hat{U}_2 \dots$ , where  $\hat{U}_n \equiv e^{\hat{A}_n}$ , with  $\hat{A}_n = \mathcal{O}(\tilde{\Omega} \tilde{\tau}_d^n)$ ,  $\tilde{\Omega} \equiv \Omega/\omega_0$  and  $\tilde{\tau}_d \equiv \omega_0 \tau_d \ll 1$ . Since  $\tilde{\Omega} \tilde{\tau}_d^m \gg \tilde{\Omega} \tilde{\tau}_d^n$  for  $m < n$ , one can approximate  $\hat{U}$  by a product of a finite number of rotations  $\hat{U}_n$ . We found the expressions for  $\hat{U}^{IA} \equiv \hat{U}_1$  (Impulsive Approximation) and  $\hat{U}^{SAS} \equiv \hat{U}_1 \hat{U}_2$  (Short-And-Strong Approximation).

From the obtained expressions, we identified the corresponding rotational axis  $\mathbf{n}$  and angle  $\theta$ . The IA yields:

$$\mathbf{n}_{IA} = \frac{1}{K_{IA}} \begin{bmatrix} -\sin \alpha_3 \cos \alpha_- \\ \sin \alpha_3 \sin \alpha_- \\ \cos \alpha_3 \sin \alpha_+ \end{bmatrix},$$

$$\theta_{IA} = 2 \sin^{-1} K_{IA},$$

where  $K_{IA} \equiv \sqrt{1 - \cos^2 \alpha_3 \cos^2 \alpha_+}$ ,  $\alpha_3 \equiv \Omega \int_0^t f(t') dt'$ ,  $\alpha_{\pm} \equiv \alpha_1 \pm \alpha_4$  with  $\alpha_1 \equiv \omega_0 t_1/2$ ,  $\alpha_4 \equiv \omega_0(t - t_1)/2$ . From the SAS we got:

$$\mathbf{n}_{SAS} = \frac{1}{K_{SAS}} \begin{bmatrix} \sin C \sin \alpha'_3 \sin \alpha_- - \cos C \sin \alpha_3 \cos \alpha_- \\ \sin C \sin \alpha'_3 \cos \alpha_- - \cos C \sin \alpha_3 \sin \alpha_- \\ \sin C \cos \alpha'_3 \cos \alpha_+ - \cos C \cos \alpha_3 \sin \alpha_+ \end{bmatrix},$$

$$\theta_{SAS} = 2 \sin^{-1} K_{SAS},$$

where  $C \equiv \sqrt{A^2 + B^2}$ ,  $\tan \beta = A/B$ ,  $K_{SAS} \equiv \sqrt{1 - k_{SAS}^2}$ ,  $\alpha'_3 = \alpha_3 + \beta$  with:

$$k_{SAS} \equiv \cos C \cos \alpha_3 \cos \alpha_+ - \sin C \cos \alpha'_3 \sin \alpha_+,$$

$$A \equiv \Omega \omega_0 \int_0^t f(t')(t' - t_1) \cos(2\alpha_3(t')) dt',$$

$$B \equiv \Omega \omega_0 \int_0^t f(t')(t' - t_1) \sin(2\alpha_3(t')) dt'.$$

## References

1. *Moskalenko A.S.* [et al.]. Charge and spin dynamics driven by ultrashort extreme broadband pulses: A theory perspective // *Phys. Rep.* 2017. V. 672. P. 1–82.
2. *Campbell W.C.* [et al.]. Ultrafast gates for single atomic qubits // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 105(9): 090502.
3. *Romero G.* [et al.]. Ultrafast quantum gates in circuit QED // *Phys. Rev. Lett.* 2012. V. 108(12): 120501.

4. *Press D.* [et al.]. Complete quantum control of a single quantum dot spin using ultrafast optical pulses // *Nature*. 2008. V. 456. P. 218–221.
5. *Zhou B. B.* [et al.]. Accelerated quantum control using superadiabatic dynamics in a solid-state lambda system // *Nature Phys.* 2016. V. 13(4). P. 330–334.

UDC 530.145

## The light-cone approximation method in the problem of nonstationary dynamics of open quantum systems

*E. A. Polyakov<sup>1</sup>, G. M. Sultanov<sup>1,2</sup>, N. S. Arefieva<sup>1,3</sup>, D. V. Kuznetsova<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup>Russian Quantum Center

<sup>2</sup>National Research Nuclear University MEPhI

<sup>3</sup>Moscow Institute of Physics and Technology

Nowadays, non-equilibrium many-body dynamics is being investigated in rapidly growing fields, like condensed matter and synthetic quantum systems such as ultracold atoms [1]. Despite this, the description of such systems is still quite complicated, because working with nonequilibrium states we unavoidably face with exponential blowup of complexity, associated with the dynamical growth of quantum entanglement [2, 3]. In this work we propose *the light-cone approximation method*, solving this problem and showing that the complexity of real-time motion is effectively bounded.

Suppose we have a quantum impurity model-like system [4]. Impurity interacts with the environment through some degree of freedom, let us call it the *coupling site*. We consider the interaction quench. At zero time point an impurity (in some state) starts interacting; the environment is in its ground state. As a result, entanglement and correlations propagate gradually along a light cone called the Lieb–Robinson light cone [5]. Consequently, the degrees of freedom are coupled one by one, getting inside the light cone.

One of the main results of our work is that we have developed an a priori estimate of the light cone in such a way, that before solving the many-particle problem, we estimate which degrees of freedom at which times come inside the light cone. We did it by considering, how a single quantum freely propagates from the coupling site. The wavefunction of a single quantum is a superposition of its position on different sites of the chain:

$$|\phi(t)\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \phi_k(t)|k\rangle. \quad (1)$$

Under the free propagation all the possible single-particle states by the moment  $t$  are covered by  $\{|\phi(\tau)\rangle: 0 \leq \tau \leq t\}$ . The maximum entropy estimate of the one-body reduced density matrix of all the quanta emitted during an interval  $[0, t]$  is:

$$\rho_+(t) = \mathcal{N}^{-1} \int_0^t d\tau |\phi(\tau)\rangle \langle \phi(\tau)|. \quad (2)$$

To heuristically evaluate whether the degree of freedom of an environment has come inside the light cone, we evaluate its statistical significance. By introducing a threshold  $a_{\text{cut}}$ , we get what we call the *Lieb–Robinson metric*:

$$g(\chi, t|\phi_{\text{loc}}, 0) = \langle \chi|\rho_+(t)|\chi\rangle - a_{\text{cut}} \quad (3)$$

for trial degree of freedom  $\chi$ , and for mode  $\phi_{\text{loc}}$  corresponding to the coupling site. If  $g(\chi, t|\phi_{\text{loc}}, 0) < 0$  then the contribution of state is negligible and can be discarded.

In addition to the forward light cone, due to the time-reversal symmetry, it is possible establish the existence of the backward light cone — an irreversible decoupling of the degrees of freedom from the local interacting site. This allowed us to a priori analyze the flow of degrees of freedom between the minimal forward and backward light cones and construct a renormalization group procedure for solving the problem of nonstationary dynamics.

The renormalization group was implemented numerically, based on the specially developed by us python module *fockspy* for calculations in second quantization. We performed a series of calculations for the spin-boson model and for the fermionic resonant-level model. Using the light-cone approximation method, we have shown that there is a balance between the flows of incoming and outgoing modes (fig. 1). Also, the total population of significant modes is limited (fig. 2). These preliminary results also show that the dynamics of the considered impurity models, and of the chain sites, agree with the numerically exact results on time intervals where

calculations can be performed. Thus, we possibly overcome entanglement barriers — the complexity problem of real time motion.

At the moment, we are working on expanding the area of applicability of the presented method to another types of environment, such as non-linear bath (Bose–Hubbard Model), a spin bath and the case, when the environment is a chaotic non-integrable systems.

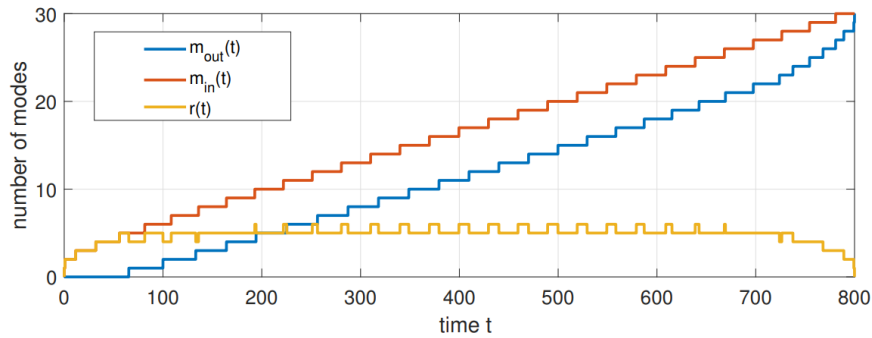


Fig. 1. Number of coupled (red gr.), irreversibly decoupled (blue gr.) modes and difference between them (yellow gr.)

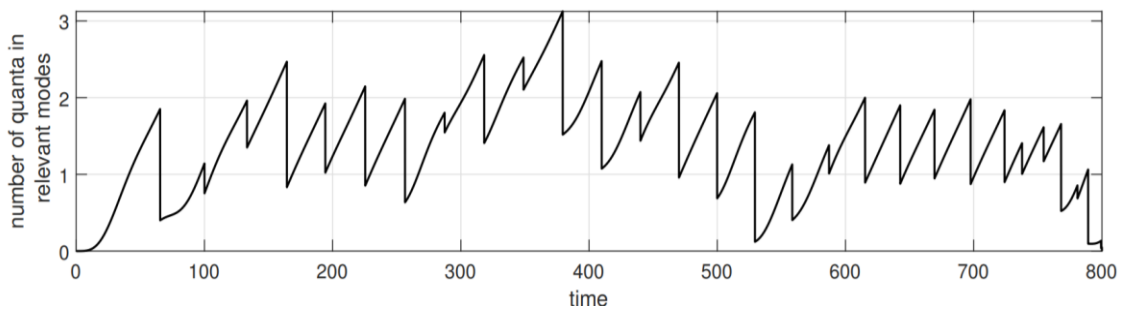


Fig. 2. Total occupation of relevant modes is limited. The irreversibly decoupled modes can be traced out (stochastically) as soon as they occur during the real-time evolution

### Bibliography

1. Bloch I., Dalibard J., Zwirger W. Many-body physics with ultracold gases//Rev. Mod. Phys. 2008. V. 80(3). P. 885–964.
2. Polyakov E. A. Real-time motion of open quantum systems: Structure of entanglement, renormalization group, and trajectories//Phys. Rev. B. 2022. V. 105(5):054306.
3. Leroze A., Sonner M., Abanin D. A. Overcoming the entanglement barrier in quantum many-body dynamics via space-time duality//Phys. Rev. B. 2023. V. 107(6):L060305.
4. Breuer H.-P., Petruccione F. The Theory of Open Quantum Systems.—New York: Oxford University Press, 2007. P. 15, 19, 57–60, 441.
5. Bravyi S., Hastings M.B., Verstraete F. Lieb-Robinson bounds and the generation of correlations and topological quantum order//Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97(5):050401.

---

## Секция прикладной геофизики

---

Председатель: С. А. Тихоцкий (д. ф.-м. н., член-корреспондент РАН)

Зам. председателя: Н. В. Дубиня (к. ф.-м. н.)

Секретарь: В. А. Начев

---

Дата: 06.04.2023

Время: 10:00

УДК 53.092

### Задержанный пампинг-эффект в подземном помещении

*Ю. Н. Ерошенко<sup>1</sup>, Л. Б. Безруков<sup>1</sup>, И. С. Карников<sup>1</sup>, В. В. Казалов<sup>1</sup>, А. К. Межох<sup>1</sup>, С. В. Ингерман<sup>1</sup>,  
В. В. Синев<sup>1,2</sup>, Н. Ю. Агафонова<sup>1</sup>, Е. А. Добрынина<sup>1</sup>, Р. И. Еникеев<sup>1</sup>, И. Р. Шакирьянова<sup>1</sup>,  
Н. А. Филимонова<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup>Институт ядерных исследований РАН

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

<sup>3</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В подземной лаборатории НИИЯФ МГУ на глубине 10 м проведены измерения концентрации положительных и отрицательных ионов с помощью модифицированного счетчика аэроионов «Сапфир-3М» [1] и концентрации радона с помощью радометра «Альфарад-плюс».

Выполнен корреляционный анализ концентраций радона и аэроионов для пар переменных «давление–радон» и «давление–ионы». Для радона обнаружен «задержанный пампинг-эффект» — эффект выхода газа из грунта при понижении атмосферного давления. Ранее аналогичный эффект наблюдался для нейтронов [2].

Мы объясняем задержанный пампинг-эффект постепенным накоплением количества радона в лаборатории в результате уменьшения атмосферного давления. В начале периода уменьшения давления количество радона в лаборатории лишь начинает возрастать, поэтому максимум количества радона приходится на более позднее время — вариации количества радона смещены вперед по времени по сравнению с вариациями атмосферного давления. Этот эффект описан нами в рамках двух моделей.

В первой модели постоянный поток радона в подземной лаборатории промодулирован вариациями атмосферного давления. Во второй модели поток радона в помещении увеличивается лишь при уменьшении атмосферного давления ниже средней величины. При увеличении давления выше среднего в этой модели происходит обратное всасывание воздуха, однако оно практически не влияет на количество радона, поскольку имеющийся в помещении радон уже значительно разбавлен воздухом.

Полученное хорошее согласие в положении экстремумов рассчитанной и измеренной корреляционных функций показано на рис. 1. Баланс темпа накопления радона, времени его радиоактивного распада и характерного времени вариаций давления приводит к величине эффективной задержки в двое суток между вариациями переменных «давление–радон». Корреляционный анализ для переменных «давление–ионы» свидетельствует о том, что в воздухе, выносящем радон в лабораторию, уже присутствуют ионы, образовавшиеся в порах грунта. Эти ионы составляют примерно 21% от общего числа ионов в помещении.

Эксперименты по измерению вариаций радона и ионов в подземных лабораториях, например Лаборатории Гран Сассо (Италия), могут иметь важное практическое применение — прогнозирование землетрясений [3]. Вариации атмосферного давления  $p$  приводят к изменению потока радона  $Q$  согласно выражению  $Q = \alpha(p_1 - p)$ , где  $\alpha = \text{const}$ ,  $p_1 = \text{const}$ . В случае подготовки землетрясения изменение потока радона может происходить под влиянием вариаций давления в геологической среде  $p_1$ , если перед землетрясением до места наблюдения дошли упругие сдвиги либо эти сдвиги могли повлиять на эффективную структуру пор и трещин, на их размеры.

Исследование выполнено при финансовой поддержке по гранту Российского научного фонда 23-22-00048.



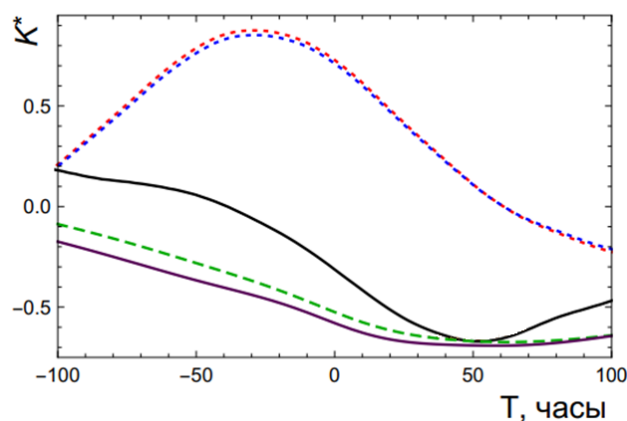


Рис. 1. Верхняя сплошная кривая — корреляционная функция давления и радона по измерениям радиометром радона «Альфарад-плюс», штрихованная кривая — корреляционная функция тех же величин, полученная путем вычисления по модели I. Точечная кривая с наибольшим значением в максимуме показывает корреляционную функцию положительных ионов с радоном, а вторая точечная кривая — корреляционную функцию отрицательных ионов с радоном. Нижняя сплошная кривая показывает корреляционную функцию давления и радона в рамках модели II

### Литература

1. Безруков Л. Б. [и др.] Наблюдение избытка положительных аэроионов в подземных полостях // Геомagnetизм и аэрoномия. 2022. Т. 62. № 6. С. 755–768.
2. Стенькин Ю. В. [и др.]. Подземная физика и нелинейный задержанный барометрический эффект гамма-фона // ЖЭТФ. 2020. Т. 158. Вып. 3. С. 469–473.
3. Агафонова Н. Ю. [и др., коллаборация LVD]. Отклик детектора LVD на землетрясения в центральной Италии // Изв. РАН. Сер. физическая. 2021. Т. 85. № 11. С. 1661–1665.

УДК 550.83.04

## Мониторинг опасных геологических процессов и явлений в верхней части разреза по данным съемок 3D-инженерной сейсморазведки МОГТ разных лет. Шельф Черного моря

П. А. Щуплов<sup>1</sup>, А. С. Пирогова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

В работе представлена оценка изменения интенсивности и пространственного распределения сейсмоакустических аномалий на шельфе Черного моря, связанных с повышенной газонасыщенностью отложений, и, соответственно, представляющих потенциальные риски для проведения буровых работ. Изменения рассматриваются на временном промежутке в 2 года — с 2019 по 2022 гг. Оценка проводилась по двум наборам данных 3D-сейсморазведки МОВ-ОГТ сверхвысокого разрешения, полученным в 2019 и 2022 гг. При этом указанные сейсмические съемки нельзя отнести к классической 4D мониторинговой съемке, так как параметры методик двух съемок несколько отличались. В 2019 г. была проведена сейсморазведка сверхвысокого разрешения (ССВР) в частотном диапазоне 100÷500 Гц. Съемка ССВР 2022 г. обеспечила возбуждение и регистрацию сигналов более высокочастотного состава, 250÷1000 Гц. В работе рассмотрены прикладные аспекты обработки данных, направленной на приведение двух наборов данных к идентичным условиям возбуждения и приема, которое, в свою очередь, необходимо для мониторинга условий в верхней части разреза по этим данным.

Для мониторинга изменения свойств среды, степени газонасыщенности разреза и пластового давления на двух наборах данных после специализированной обработки проводился динамический анализ. Сначала выполнялась оценка на качественном уровне: были рассчитаны карты различных атрибутов, проанализировано изменения распределения аномальных зон. На рис. 1 показаны схемы RMS-амплитуд, на которых видно изменение положения крупных высокоамплитудных аномалий, предположительно связанных с газонасыщением.

Следующим шагом был переход к количественному анализу: была выполнена акустическая сейсмическая инверсия, которая позволила построить модели акустических импедансов отложений шельфа Черного моря. Был выбран алгоритм инверсии, основанный на модели [1]. По результатам инверсии удалось проследить изменение положения аномальных зон, связанных с газонасыщенностью, оценить возможные пути миграции флюида. Полученные результаты показали хорошую корреляцию с данными инженерно-геологического бурения.

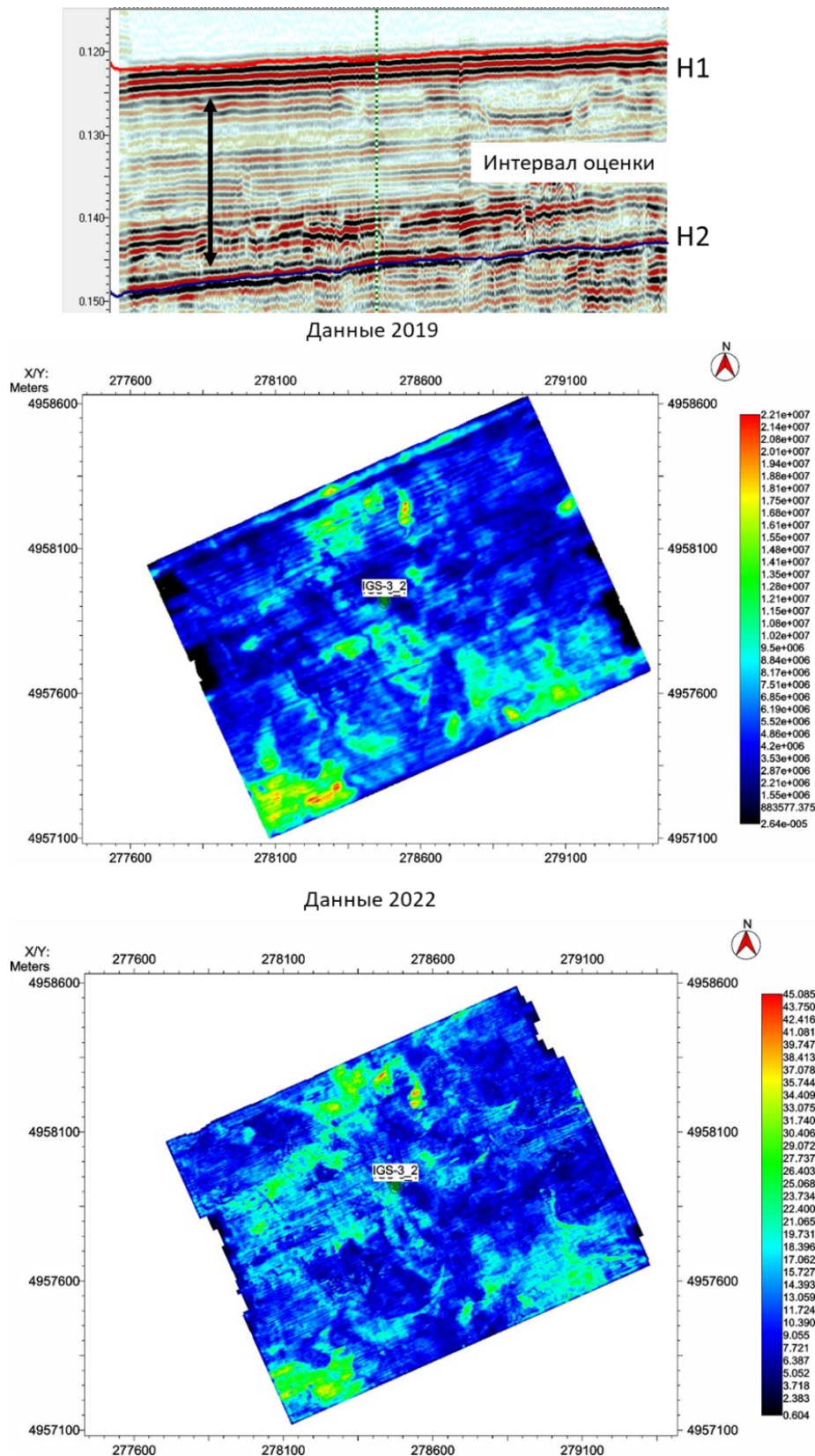


Рис. 1. Схемы RMS амплитуд по двум наборам данным, рассчитанные в интервале между горизонтом N1 и N2

## Литература

1. *Данько Д. А.* Сравнение методов детерминистической акустической инверсии для выделения акустически контрастных объектов по сейсмическим данным // *Геофизика*. 2016. № 1. С. 2–11.

УДК 544.6.076.2

### Исследование характеристик шестиэлектродного датчика МЭТ при различных температурах

*А. В. Акинина<sup>1,2</sup>, И. В. Егоров<sup>1,2</sup>, В. М. Агафонов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>ООО «Р-сенсорс»

Сейсмические датчики используются для измерения малых вибраций в сейсмологии, разведке полезных ископаемых, мониторинге строительных конструкций, контроле за ядерными испытаниями. Они часто применяются в полевых измерениях и должны иметь стабильные характеристики в широком температурном диапазоне. В последние годы распространение получила разновидность сейсмических датчиков, известных как электрохимические датчики, которые используют жидкость как инерциальную массу и электрохимические реакции на электродах как физический механизм для преобразования сигнала. Доставка компонентов к электродам зависит от движения жидкости в электрохимической ячейке, следовательно, от внешних вибраций. Достоинствами электрохимических датчиков являются высокая чувствительность, в том числе в области низких частот, простая и надежная механическая конструкция, невысокие требования к точности установки датчиков по отношению к вертикали.

В частности, при комнатной температуре коэффициент преобразования электрохимических датчиков в 10–100 раз [1–3] выше, чем у электромеханического геофона, который является основным прибором в сейморазведке. Дополнительно известно, что чувствительность электрохимических датчиков определяется вязкостью рабочей жидкости и коэффициентом диффузии активных ионов, участвующих в электрохимических электродных реакциях. Вязкость и коэффициент диффузии зависят от температуры. При этом ситуация различается в зависимости от рассматриваемого температурного диапазона. Если рабочие температуры выше 258 К, то в качестве рабочей жидкости используют водный раствор KI, для которого вязкость и коэффициенты диффузии ионов относительно слабо меняются с температурой. Соответственно, электрохимические датчики сохраняют свое преимущество по высокой чувствительности. Для более широких диапазонов рабочих температур применяются растворы на основе LiI, а также ионные жидкости. Для них температурные зависимости характеристик более существенны. Преимущества по чувствительности электрохимических датчиков над электромеханическими геофонами полностью нивелируются при низких температурах.

Проблема обеспечения стабильных характеристик в широком диапазоне низких температур в настоящее время решается с использованием электронных цепей. Их коэффициент усиления также зависит от температуры и частоты, компенсируя температурные изменения свойств рабочей жидкости. Дополнительная стабилизация характеристик обеспечивается путем использования силовой отрицательной обратной связи. Совместное применение указанных подходов позволяет обеспечить устойчивость коэффициента преобразования до 233 К. Однако требуется увеличения усиления в электронике и неизбежно отражается в увеличении шумов системы датчик/электроника.

Принципиально проблема уменьшения чувствительности электрохимических датчиков и связанного с этим роста шумов на низких температурах может быть решена повышением коэффициента преобразования первичного чувствительного элемента. В нашей работе для данной цели предлагается использовать шестиэлектродную электрохимическую ячейку.

По сравнению со стандартной четырехэлектродной электрохимической ячейкой в конструкции, которая была рассмотрена в работе, пара дополнительных электродов (G) была добавлена вне стандартной конфигурации ячейки АССА (анод–катод–катод–анод), которые показаны на рис. 1 и 2.

Ранее было принципиально показано [4], что для такой 6-электродной конфигурации, чувствительность датчиков можно изменять, используя методы управления межэлектродными потенциалами в рабочей точке. В настоящей работе исследована возможность использования 6-электродной конфигурации ячейки и управляемого изменения потенциалов на электродах для обеспечения лучшей стабильности коэффициента преобразования в широком температурном диапазоне от 296 К (комнатная температура) до 233 К.

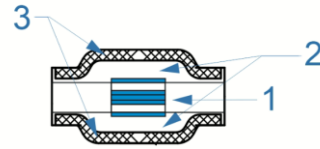
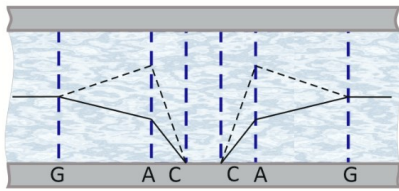


Рис. 1. Расположение электродов в шестиэлектродной электрохимической ячейке

Рис. 2. Строение электрохимической ячейки: 1 — шестиэлектродная ячейка, заключенная в керамический корпус, 2 — раствор электролита, 3 — мембраны

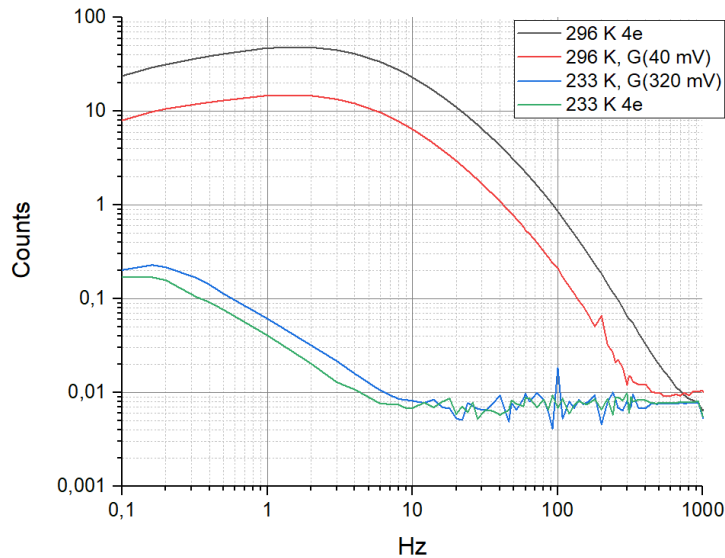


Рис. 3. Амплитудно-частотные характеристики четырехэлектродной (ACCA) и шестиэлектродной (G-ACCA-G) электрохимических ячеек при температурах 296 К и 233 К с потенциалом 40 мВ и 320 мВ на анодах G

Экспериментально было подтверждено, что, применяя зависящий от температуры закон изменения управляющего потенциала, можно существенно, до 5 раз, уменьшить изменение коэффициента преобразования электрохимических датчиков движения ячеек при изменении температуры (рис. 3). Отметим, что более стабильное поведение коэффициента преобразования достигается без изменения коэффициента преобразования сопутствующей электроники и связанного с этим влиянием собственных шумов электроники на регистрируемый сигнал.

### Литература

1. Huang H., Agafonov V., Yu H. Molecular electric transducers as motion sensors: a review // *Sensors*. 2013. V. 13(4). P. 4581–4597.
2. Qi W. [et al.]. MEMS based triaxial electrochemical seismometer // 15th International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular System (NEMS), San Diego, CA, USA, 2020. — IEEE, 2020. P. 59–62. DOI: 10.1109/NEMS50311.2020.9265585.
3. Potylitsyn V. [et al.]. Study of the piezoelectric effect of the second kind using molecular sensors // *Sensors*. 2021. V. 21(7): 2301. DOI: 10.3390/s21072301.
4. Agafonov V., Egorov I., Akinina A. MET sensor with a sensitivity controlled by electrical signals // Proc. 12th International Advances in Applied Physics & Materials Science Congress & Exhibition (APMAS 2022), Oludeniz, Turkey, 13–19 October 2022. P. 87.

## Численное моделирование деформаций спирально закрученного оптоволоконного кабеля под воздействием плоских сейсмических волн

Е. Чулков<sup>1</sup>, С. А. Тихоцкий<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup> Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН

Распределенное акустическое зондирование (*DAS — distributed acoustic sensing*) является технологией детектирования деформаций оптоволоконного кабеля, основанном на явлении рэлеевского рассеяния когерентного оптического импульса на неоднородностях оптического волокна. Благодаря тому, что оптоволокно обладает высокой устойчивостью к воздействиям внешней среды, DAS-системы могут быть отличным решением для длительного использования. Также важным фактором распространения DAS является дешевизна оптоволоконного кабеля, что позволяет вести сейсморазведку на десятках километров, используя один оптоволоконный кабель.

Из-за того, что стекло является относительно жестким материалом, прямой оптоволоконный кабель не регистрирует сейсмические волны, падающие нормально к поверхности кабеля. Поэтому необходимо исследовать влияние формы оптоволоконного кабеля на диаграмму направленности. Концепция кабеля со спирально закрученным оптоволоконным кабелем была предложена ранее и протестирована в полевых условиях [2]. В работе [1] приведено теоретическое объяснение взаимодействия спирально закрученного оптоволоконного кабеля с сейсмическими волнами.

В отличие от традиционных сейсмических датчиков, в системах DAS деформация измеряется из разности фаз между двумя точками, расстояние между которыми называется «базой приема» (*GL — gauge length*). Важно, что измеряемой величиной является суммарное изменение участка оптоволоконного кабеля длиной *GL*. В представленной работе был выполнен численный расчет отклика DAS-системы в случае, когда спирально закрученное оптоволокно «вморожено» в окружающую среду. Это аналогично предположению, что упругие свойства кабеля совпадают со свойствами среды и сцепление идеально. Такое упрощение хоть и не отвечает существующим датчикам, позволяет выявить основные закономерности вида диаграммы направленности путем численного интегрирования вдоль линии оптоволоконного кабеля. Результаты численного интегрирования при длинах *GL*, равных длине одного витка, совпадают с результатами (рис. 1), полученными теоретически в работе [1]. Также была построена модель спирально закрученного оптоволоконного кабеля в программном обеспечении ABAQUS для численного расчета динамической задачи методом конечных элементов. В дальнейшем планируется выполнить численное моделирование деформаций оптоволоконного кабеля для разных углов подъема спирали, длинах волн, углах падения волн и свойств кабеля и среды. Эти данные будут использованы для расчета отклика DAS-системы с различными *GL*.

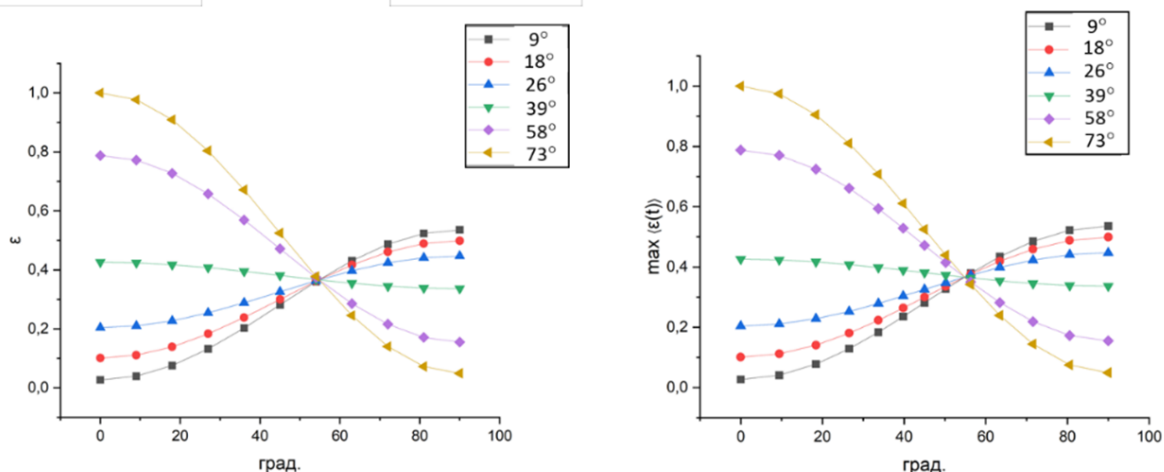


Рис. 1. Относительное изменение амплитуды отклика витого оптоволоконного датчика в зависимости от угла падения продольной упругой волны при различных  $GL \ll \lambda$  и углах подъема спирали: слева — расчет по формуле из работы [1]; справа — результат численного интегрирования

Работа выполнена в рамках проекта «Разработка и создание аппаратно-программного модульного регистрирующего комплекса с гибридной телеметрией для проведения наземной и морской сейсмораз-

ведки и сейсмического мониторинга», поддержанного Минобрнауки РФ по итогам конкурса на определение получателей субсидий из федерального бюджета на развитие кооперации российских образовательных организаций высшего образования, государственных научных учреждений и организаций реального сектора экономики в целях реализации комплексных проектов по созданию высокотехнологичных производств (14 очередь), соглашение 075-11-2022-030 от 08.04.2022.

### Литература

1. *Kuvshinov B. N.* Interaction of helically wound fibre-optic cables with plane seismic waves // *Geophys. Prosp.* 2016. V. 64. P. 671–688. DOI: 10.1111/1365-2478.12303.
2. *Hornman J. C.* Field trial of seismic recording using distributed acoustic sensing with broadside sensitive fibre-optic cables // *Geophys. Prosp.* 2017. V. 65. P. 35–46. DOI: 10.1111/1365-2478.12358.

УДК 004.932, 552.086, 519.246

### Исследование различных дескрипторов границы порового пространства для его реконструкции методом восстановления фазы

*А. М. Черкасов<sup>1</sup>, А. Н. Хлюпин<sup>1</sup>, К. М. Герке<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт физики Земли имени О. Ю. Шмидта РАН

Задача реконструкции трехмерного порового пространства по его двумерным сечениям постоянно возникает в нефтегазовой отрасли [11], пищевой промышленности [4], материаловедении и почвоведении [1, 5, 6], электрохимии и медицине [7, 10]. В силу своей недоопределенности она не может быть решена однозначно, но может быть сведена к реконструкции вероятной геометрии, отражающей те или иные статистические свойства оригинального образца, что, в свою очередь, приведет к сохранению тех или иных физических свойств. Таким образом, фактически мы имеем дело с обратной задачей, которая может быть формализована посредством введения количественных дескрипторов (метрик качества) порового пространства и последующей реконструкции с опорой на отличия этих дескрипторов у оригинала и реконструкции. Для решения данной задачи существуют различные подходы, использующие такие методы, как имитация отжига [3], усеченные гауссовы случайные поля [8], многоточечные статистики [11], метод восстановления фазы [2].

Алгоритм восстановления фазы по своей сути основан на использовании двухточечной автокорреляционной функции  $S_2$  порового пространства. Опыт предыдущих исследований [2, 9] показал, что реконструкция на основании только лишь этой метрики в силу ее вырожденности приводит к результатам невысокого качества, в частности, зашумленным изображениям. В то же время алгоритм восстановления фазы имеет свободные параметры (например, ширина фильтра), которые могут быть выбраны таким образом, чтобы удовлетворить какому-либо из дескрипторов, отличных от  $S_2$ . Особый интерес представляют собой дескрипторы, связанные с границей, поскольку возникновение артефактов реконструкции приводит к существенному росту границы реконструируемой фазы. В данной работе нами проведен сравнительный анализ влияния различных метрик качества поверхности (функционалы Минковского, автокорреляционные функции границы и производные от них) на качество реконструкции и ее фильтрационно-емкостные свойства. В частности, было выявлено, что реконструкция с использованием этих методов не приводит к существенным отличиям как внешнего вида, так и фильтрационно-емкостных свойств реконструкций, что оставляет за исследователем некоторую свободу выбора того или иного дескриптора в соответствии с задачами, стоящими перед ним.

### Литература

1. *Chen S., Li H., Jiao Y.* Dynamic reconstruction of heterogeneous materials and microstructure evolution // *Phys. Rev. E.* 2015. V. 92 (2): 23301.
2. *Cherkasov A.* [et al.]. Adaptive phase-retrieval stochastic reconstruction with correlation functions: Three-dimensional images from two-dimensional cuts // *Phys. Rev. E.* 2021. V. 104(3): 35304.
3. *Cule D., Torquato S.* Generating random media from limited microstructural information via stochastic optimization // *J. Appl. Phys.* 1999. V. 86(6). P. 3428–3437.
4. *Derossi A.* [et al.]. Mimicking 3D food microstructure using limited statistical information from 2D cross-sectional image // *J. Food Eng.* 2019. V. 241. P. 116–126.

5. *Jiao Y., Chawla N.* Modeling and characterizing anisotropic inclusion orientation in heterogeneous material via directional cluster functions and stochastic microstructure reconstruction // *J. Appl. Phys.* 2014. V. 115(9): 93511.
6. *Karsanina M. V.* [et al.]. Universal spatial correlation functions for describing and reconstructing soil microstructure // *PLoS one.* 2015. № 10(5): e0126515.

УДК 550.3

## Исследование реологии недр Земли

*D. O. Amorim<sup>1</sup>, T. B. Гудкова<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>ИФЗ РАН, Лаборатория происхождения, внутреннего строения и динамики Земли и планет (102)

Исследование реологии недр Земли важно, так как реологические модели применяются в ряде задач, например, при изучении приливов и других колебательных процессов в твердой Земле, изучении распределения вязкости и добротности в недрах Земли, исследовании других тел солнечной системы и т. д. В данной работе применяется реология Андраде для описания мантии Земли, и главная цель — определить, при каких значениях ее параметров можно удовлетворить наблюдаемым значениями чисел Лява, приливного сдвига фазы и добротности планеты.

На основе модели Земли PREM [1] и алгоритма, предложенного в [2], создана программа на Python для расчета чисел Лява Земли. Неупругость в недрах учитывается с помощью реологии Андраде [3, 4]. Эта модель задает закон преобразования упругого модуля сдвига  $\mu$  в комплексную величину  $\bar{\mu}$  и зависит от частоты процесса  $\chi$  и от вязкости среды  $\eta$ :

$$\bar{\mu}^{-1} = J = J_0 [1 + (i\chi\tau_M\zeta)^{-\alpha} \Gamma(1 + \alpha) - i(\chi\tau_M)^{-1}],$$

где  $J$  — комплексная податливость,  $J_0 = \mu^{-1}$ ,  $\Gamma$  — гамма-функция,  $\tau_M = \eta/\mu$  — время Максвелла, а  $\alpha$  и  $\zeta$  — эмпирические параметры.

Период исследуемого прилива ( $M_2$ ) — 12 часов 25 минут. Распределение вязкости на Земле не определено точно, но на основе современных оценок [5–10] построены два пробных распределения, служащих верхним и нижним пределами.

Для применения реологии Андраде остается определить параметры  $\alpha$  и  $\zeta$ . Эксперименты с различными минералами обычно указывают на  $\alpha \in (0,15; 0,4)$  и  $\zeta \sim 1$  [3, 4]. С другой стороны, исследования частотной зависимости добротности Земли указывают на  $\alpha \in (0,1; 0,2)$  [11, 12], а условия, при которых  $\zeta \sim 1$ , могут вовсе не выполняться в мантии Земли [4]. Большой разброс значений этих параметров приводит к нежелательной погрешности при построении различных моделей.

Цель этой работы — уменьшить неопределенность параметров  $\alpha$  и  $\zeta$  для земного вещества. Для этого мы вычисляем числа Лява  $k_2$ ,  $h_2$ ,  $l_2$  и  $k_3$ , приливной сдвиг фазы  $\epsilon$  и добротность  $Q$  Земли при  $\alpha \in (0,05; 0,4)$ ,  $\zeta \in (0,01; 10000)$  и при различных профилях вязкости ( $\eta$ ), затем сравниваем полученные значения с наблюдаемыми [13–15]. Расчет этих чисел для всех комбинаций значений  $\alpha$ ,  $\zeta$  и  $\eta$  может занимать сутки. Для ускорения процесса применяется параллельное программирование.

Сравнение полученных модельных значений с экспериментальными [13–15] показывает, что одновременно удовлетворить всем условиям по  $k_2$ ,  $h_2$ ,  $l_2$ ,  $k_3$  и  $\epsilon$  возможно только при  $\zeta > 1$  и при  $\alpha \sim 0,15$ . Это согласуется с результатами различных исследований частотной зависимости добротности Земли, в которых получено  $\alpha \in (0,1; 0,2)$  [11–12]. Во многих теоретических работах о планетных недрах  $\zeta$  принимается равным 1, а  $\alpha > 0,2$ , что, согласно нашим результатам, необоснованно.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00074.

### Литература

1. *Dziewonski A. M., Don L. A.* Preliminary reference Earth model // *Phys. Earth Planet. Inter.* 1981. V. 25(4). P. 297–356.
2. *Michel A., Boy J.-P.* Viscoelastic Love numbers and long-period geophysical effects // *Geophys. J. Int.* 2022. V. 228(2). P. 1191–1212.
3. *Castillo-Rogez J. C., Efroimsky M., Lainey V.* The tidal history of Iapetus: Spin dynamics in the light of a refined dissipation model // *J. Geophys. Res.: Planets.* 2011. V. 116: E09008.
4. *Efroimsky M.* Tidal dissipation compared to seismic dissipation: In small bodies, Earths, and super-Earths // *Astrophysical J.* 2012. 746(2): 150.
5. *Koot L., Dumberry M.* Viscosity of the Earth's inner core: Constraints from nutation observations // *Earth Planet. Sci. Lett.* 2011. V 308(3–4). P. 343–349.

6. Čížková H. [et al.]. The viscosity of Earth's lower mantle inferred from sinking speed of subducted lithosphere // *Phys. Earth Planet. Inter.* 2012. V. 200. P. 56–62.
7. Reusen J. M. [et al.]. Long-wavelength gravity field constraint on the lower mantle viscosity in North America // *J. Geophys. Res.: Solid Earth.* 2020. V. 125(12) e2020JB020484.
8. Harig C., Zhong S., Simons F. J. Constraints on upper mantle viscosity from the flow-induced pressure gradient across the Australian continental keel // *Geochem. Geophys. Geosyst.* 2010. V. 11(6): Q06004.
9. Nakada M., Okuno J., Yokoyama Y. Total meltwater volume since the Last Glacial Maximum and viscosity structure of Earth's mantle inferred from relative sea level changes at Barbados and Bonaparte Gulf and GIA-induced J2 // *Geophys. J. Int.* 2016. V. 204(2). P 1237–1253.
10. Bills Bruce G., Donald R. Currey, Grant A. Marshall. Viscosity estimates for the crust and upper mantle from patterns of lacustrine shoreline deformation in the Eastern Great Basin // *J. Geophys. Res.: Solid Earth.* 1994. V. 99(B11). P. 22059–22086.
11. Smith M. L., Dahlen F. A. The period and Q of the Chandler wobble // *Geophys. J. Int.* 1981. V. 64(1). P. 223–281.
12. Eanes R. J., Bettadpur S. V. Temporal variability of Earth's gravitational field from satellite laser ranging // *Global Gravity Field and Its Temporal Variations: Symposium No. 116 Boulder, CO, USA, July 12, 1995.* — Berlin: Springer, 1996. P. 30–41.
13. Ray R. D., Eanes R. J., Lemoine F. G. Constraints on energy dissipation in the Earth's body tide from satellite tracking and altimetry // *Geophys. J. Int.* 2001. V. 144(2). P. 471–480.
14. Rutkowska M., Jagoda M. Estimation of the elastic Earth parameters using the SLR LAGEOS 1 and LAGEOS 2 data // *Acta Geophys.* 2010. V. 58. P. 705–716.
15. Luzum B., Petit G. The IERS Conventions (2010): Reference systems and new models // *Proc. Int. Astron. Union.* 2012. V. 10(H16). P. 227–228.

УДК 539.37

## Численное и физическое моделирование методов фотоупругости для задач геофизики

**И. В. Рубликов**

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В работе исследуется распределение напряжений в сплошной среде при неизвестной внешней нагрузке. Рассмотрен метод фотоупругости, позволяющий наглядно продемонстрировать распределение векторов главных напряжений в твердом теле. Метод основан на оптической анизотропии материала пластинки в лабораторной установке при появлении внешней нагрузки [1]. Прозрачный исследуемый образец освещается поляризованным светом. Набег фаз электромагнитной волны в разных точках зависит от направления и величины главных векторов механического напряжения образца. Наблюдается результат проявления эффекта фотоупругости: темные и светлые участки образца в зависимости от разности фаз интерферировавших лучей. В нашем опыте такими участками являются полосы, касательными к которым являются направления главных векторов тензора напряжений Коши (рис. 1).

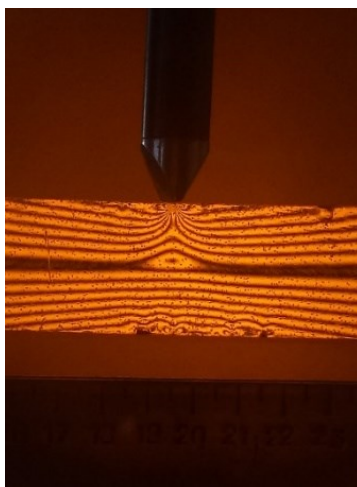


Рис. 1. Результат прохождения поляризованного света через анизотропную среду

В первой части опыта заданы величины и точки приложения нагрузок, во второй — нагрузка приложена нелинейно; задачей является нахождение временной зависимости нагрузки.



В следующей части работы было проведено численное моделирование того же образца с применением программы ABAQUS. Она позволяет задать все начальные условия, внешние нагрузки, характеристики твердого тела, а также рассмотреть интересующие напряжения в произвольной точке тела.

Из механики сплошных сред известно, что тензор напряжений может быть диагонализуем путем выбора подходящей системы координат. Полученные главные векторы напряжений лежат на касательных к темным полосам на образце. Таким образом, совместив изображение пластинки с рассчитанными в программе ABAQUS векторами главных напряжений, тем самым верифицируем результаты численного моделирования и интерпретации экспериментальных данных (рис. 2).

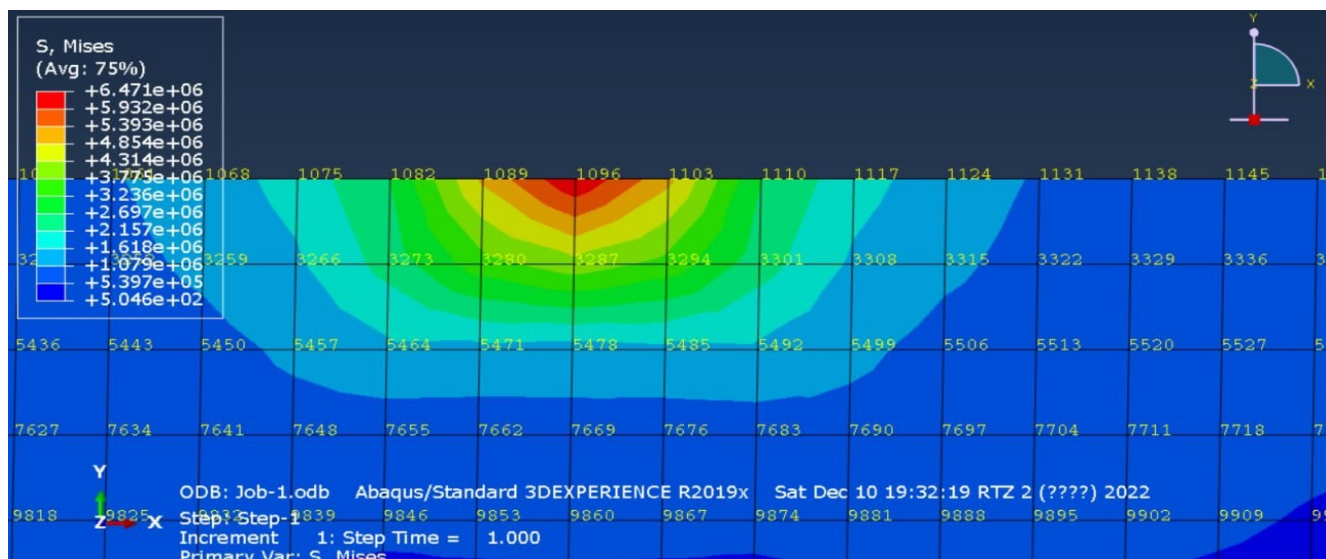


Рис. 2. Результат моделирования напряжения образца; цветом выделены модули напряжений в точках

### Литература

1. Фрохт М. М. Фотоупругость. Поляризационно-оптический метод исследования напряжений. Т. 1. — М.: ОГИЗ, 1948.

УДК 550.839

## Сравнительный анализ методов петроупругого моделирования морских слабо консолидированных осадков

*А. С. Дернова, А. С. Пирогова*

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

В работе представлен краткий теоретический обзор наиболее часто используемых петроупругих моделей слабо консолидированных морских осадков, а также рассматриваются примеры результатов их применения, приведенные авторами. Модель эффективной среды создана Дворкиным в 1999 г. [1]. Она предполагает, что упругие модули мелководных морских отложений принимают значения в диапазоне от модулей сухой породы с критической пористостью и до модулей породы с нулевой пористостью. Значения упругих модулей для породы с докритической пористостью рассчитываются с применением нижней границы Хашина–Штрикмана [2]. Преимущество модели эффективной среды состоит в возможности работать с породами с пористостью выше критической. Тогда двумя крайними случаями моделирования будут: плотная упаковка упругих зерен без скрепляющего цемента и сплошное поровое пространство без цемента или минеральных зерен. Связать такие два случая можно либо с помощью нижней границы Хашина–Штрикмана, где мягкий компонент расположен вокруг жесткого, либо с помощью верхней границы, где наиболее жесткий компонент расположен вокруг мягкого. Насыщение рассчитывается уравнением Гассмана [3].

Согласно модели Вуда [4], модуль всестороннего сжатия морских осадков представляет собой среднее значение объемных модулей твердой и жидкой фаз породы, а модуль сдвига принимается равным нулю в связи с нулевой жесткостью каркаса. В модели Ли [5] скорости поперечных волн могут быть

выражены через упругие модули всестороннего сжатия и сдвига сухой породы. Вводится также параметр консолидации, уменьшающийся с увеличением перепада давления и уменьшением пористости.

Модель контактной цементации Дворкина [6] позволяет получить упругие модули всестороннего сжатия и сдвига двухзернистой смеси с упругим цементом в зоне контакта. Количество этого цемента может быть выражено через параметр  $\alpha$  — отношение радиуса «контактного цемента» к радиусу зерна. В данной модели рассматриваются два варианта: цемент может находиться как на контакте двух зерен, так и быть распределенным по поверхности зерна.

Особняком стоят модели, не получившие широкого распространения, но примененные их авторами к локальным данным. В работе [7] дополняется контактная теория Герца–Миндлина [8], которая учитывает возможность проскальзывания на контакте двух зерен. Авторы вводят несколько дополнительных параметров: эффективный радиус кривизны контакта, доли скользящих и нескользящих контактов. Так, авторы меняют расчет эффективных упругих модулей, домножая координационное число на отношение эффективного радиуса кривизны контакта к сферическому радиусу и нормируя эффективный модуль сдвига на долю нескользящих контактов. В статье [9] авторы делают попытку объединить существующие модели, для чего вводят новые параметры: индекс жесткости матрицы, коэффициент сцепления цемента, фракцию контактного цемента, фракцию слоистых глин. Например, индекс жесткости матрицы задуман для объединения модели слабоконсолидированного песчаника [6] и жесткого песчаника [10]. Этот параметр отвечает за жесткость породы. Эти параметры используются как весовые коэффициенты, изменяясь от 0 до 1.

Применение теоретических моделей к реальным данным. В рассмотренных статьях часто применялась модель Вуда [4]: она имеет хорошую предсказывающую способность там, где скорости поперечных волн не пренебрежимо малы. В статье [11] авторы, проверяя эту модель на данных двух разных бассейнов близ Индии, приходят к выводу, что в бассейне Кришна–Гадавари скорость продольной волны предсказана хорошо, но в бассейне Маханади из-за высокой поперечной скорости произошла переоценка скорости продольной. Модель Вуда [4] применялась и в статье [1] на данных скважины в Тирренском море. Там результаты неутешительные — различие между модельными и реальными данными увеличивается с глубиной. Рядом с моделью Вуда [4] упоминают модель Ли [5]. Она применяется к данным из бассейнов близ Индии [11], где показано, что для обоих наборов данных предсказывающая способность оказалась неудовлетворительной.

Рассматривалась модель контактной цементации Дворкина [6], где также не учитывается влияние давления на упругие модули. Исследования этой модели в статье [6] были проведены на данных с Норвежского месторождения Осеберга. Авторы пытались узнать, может ли слабая цементация быть причиной расхождения фактических измерений скорости от предполагаемых модельных. Для образцов Осеберга была выбрана модель контактной цементации, так как на имеющихся шлифах был отчетливо виден скрепляющий зерна цемент. Было выявлено, что модель обладает хорошей предсказывающей способностью скоростей упругих волн для сухих пород, но недостаточной — для вычисления коэффициента Пуассона как в сухих, так и в насыщенных породах.

От описанных выше примеров следующую группу отличает применение выражений Герца–Миндлина, учитывающее влияние давления. Случай докритической пористости описан в статье [6]. Упругие модули сухой породы с критической пористостью определяются с помощью выражений Герца–Миндлина, после чего упругие модули для остальных значений пористости находятся с помощью модифицированной нижней границы Хашина–Штрикмана. Применение такой модели к образцам месторождения Тролля в Норвежском море обусловлено отсутствием цемента в шлифах, из чего авторы делают вывод о давлении как о единственной силе, удерживающей зерна между собой. Результаты моделирования подтверждают предположения, так как предсказывающая способность оказалась хорошей как в сухих, так и в насыщенных породах.

Наиболее полная модель, учитывающая давление и позволяющая работать во всем диапазоне пористости — модель эффективной среды Дворкина [1]. Она была применена дважды, в акватории Индии [11] и на образцах мелководных отложений Ки–Уэста [4]. В обоих случаях эта модель показала хорошие результаты, причем в [11] эта модель справилась лучше модели Вуда, одинаково хорошо предсказав скорости в обоих бассейнах.

Модифицированные классические модели также показали хорошие результаты. Для опробования теории скользящих и нескользящих контактов [7], авторы перебирали отношение радиуса кривизны контакта к сферическому и долю нескользящих контактов. На иллюстрациях моделирования видно, что кривые эффективных модулей, полученных по оригинальной модели Герца–Миндлина, практически никогда не совпадают со значениями глубоководной скважины в Мексиканском заливе. Но при подобранных авторами значениях доли нескользящих контактов и отношения радиусов несоответствие модельных и

реальных данных почти не наблюдается. Расширение и объединение петроупругих моделей [9] позволяет точнее предсказывать необходимые свойства: например, изменение индекса жесткости матрицы позволило точнее объяснить разделение песчаников формации Псе с трех различных месторождений у побережья Норвегии в Северном море.

Сравнив приведенные в этих статьях результаты применения моделей, авторы данной работы приходят к выводу, что модель эффективной среды, предложенная Дворкиным в 1999 г., является оптимальной для дальнейшего использования как в случаях докритической пористости, так и при пористости выше критической.

### Литература

1. *Dvorkin J., Prasad M., Sakai A., Lavoie D.* Elasticity of marine sediments: Rock physics modeling // *Geophys. Res. Lett.* 1999. V. 26(12). P. 1781–1784.
2. *Hashin Z., Shtrikman S.* A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials // *J. Mech. Phys. Solids.* 1963. V. 11(2). P. 127–140.
3. *Gassmann F.* Elasticity of porous media: Uber die elastizitat poroser medien // *Vierteljahrsschrift der Naturforschenden Gessellschaft.* 1951. V. 96. P. 1–23.
4. *Wood A. B.* A textbook of sound. — London: G. Bell and Sons, 1941.
5. *Lee M.* A simple method of predicting S wave velocity // *Geophysics.* 2006. V. 71(6). P. F161–F164.
6. *Dvorkin J., Nur A.* Elasticity of high-porosity sandstones: Theory for two North Sea data sets // *Geophysics.* 1996. V. 61(5). P. 1363–1370.
7. *Bachrach R., Avseth P.* Rock physics modeling of unconsolidated sands: Accounting for nonuniform contacts and heterogeneous stress fields in the effective media approximation with applications to hydrocarbon exploration // *Geophysics.* V. 73(6). 2008. P. E197–E209.
8. *Mindlin R. D.* Compliance of elastic bodies in contact // *ASME J. Appl. Mech.* 1949. V. 16. P. 259–268.
9. *Allo F.* Consolidating rock-physics classics: A practical take on granular effective medium models // *Leading Edge.* 2019. V. 38(5). P. 334–340.
10. *Mavko G., Mukerji T., Dvorkin J.* The rock physics handbook. — Cambridge: CUP, 1998.
11. *Dewangan P., Sriram G., Ramprasad T.* Rock physics modeling of shallow marine sediments in eastern continental margins of India // *Proc. Eighth (2009) ISOPE Ocean Mining Symposium.* — Cupertino, USA: ISOPE, 2009. P. 34–36.

УДК 550.8

### Экспериментальное исследование и модель зависимости эффективного модуля объемного сжатия трещиноватых горных пород от текущего напряженно-деформированного состояния

*Н. В. Дубиня<sup>2,1</sup>, И. В. Фокин<sup>1</sup>, О. А. Тихоцкая<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ИФЗ РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В данной работе рассмотрены результаты экспериментального исследования изменения упругих свойств трещиноватых горных пород различных типов. Была выполнена серия многостадийных псевдотрехосных испытаний образцов [1] и выполнен анализ результатов в предположении существования областей устойчивого роста трещин для различных условий нагружения. Была поставлена задача исследовать, каким образом может быть параметризована нелинейная объемная деформация и как модуль объемной упругости может быть определен по условиям нагружения — осевому и радиальному напряжениям, действующим на образец.

Условие для начала роста трещин может быть представлено как касание круга Мора, характеризующего текущее напряженное состояние образца, и критерия сухого трения на плоскости Мора ( $\sigma_n, \tau_n$ ), где  $\tau_n$  — касательное напряжение, действующее на произвольно ориентированной площадке в образце,  $\sigma_n$  — нормальное напряжение, действующее на этой же площадке. Критерий сухого трения:

$$\tau_n = \sigma_n \cdot \mu.$$

Дальнейшее увеличение осевого напряжения приводит к тому, что круг Мора начинает увеличиваться и заходит за критерий сухого трения. Параметром, позволяющим качественно характеризовать то, насколько далеко круг Мора зашел за критерий сухого трения, может служить угол  $\theta$ , определяемый как угол между двумя радиусами, проведенными к точкам пересечения круга Мора и критерия сухого трения.

В предположении, что все микротрещины, существующие в образце, равномерно распределены по пространственным ориентациям, отношение  $\theta/\pi$  может быть интерпретировано как доля трещин, по которым может произойти смещение при текущем напряженном состоянии. Такие трещины будем называть критически напряженными [2]. На таких трещинах касательное напряжение превышает нормальное, умноженное на тангенс угла внутреннего трения (критерий сухого трения превзойден).

В результате проведения экспериментов по многостадийному псевдотрехосному сжатию цилиндрических образцов горных пород с использованием сервогидравлической установки высокого давления RTR-4500 определялись значения главных напряжений и главных деформаций образца в каждый момент времени. Зависимости этих параметров друг от друга позволили определить упругие свойства образца горной породы и оценить параметры критерия прочности.

Процесс деформирования может быть достаточно качественно описан с использованием следующего определения объемного модуля упругости [3]:

$$K = \left. \frac{\partial S_d}{\partial \varepsilon_V} \right|_{S_r = \text{const}},$$

где  $\varepsilon_V$  — объемная деформация,  $S_d$  — дифференциальное напряжение,  $S_r$  — радиальное напряжение. В условиях псевдотрехосного сжатия этот модуль математически совпадает с классическим объемным модулем упругости с точностью до множителя, равного трем.

В обработку результатов эксперимента входили, таким образом, следующие этапы:

- 1) получение экспериментальной кривой напряжение — деформация;
- 2) расчет для каждого напряженного состояния доли критически напряженных трещин;
- 3) расчет параметров модели аппроксимации экспериментальной кривой;
- 4) расчет введенного объемного модуля упругости.

Основным объектом исследования являлась связь между объемным модулем упругости и долей критически напряженных трещин, находящихся в образце в каждый момент проведения эксперимента.

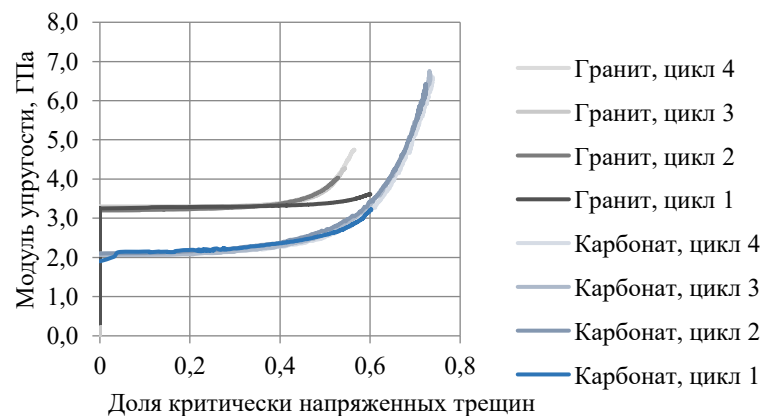


Рис. 1. Связь объемного модуля упругости и доли критически напряженных трещин

Всего было проанализировано две коллекции: коллекция из 8 гранитных образцов и коллекция из 14 карбонатных образцов. Наблюдалась общая тенденция наложения кривых, соответствующих различным циклам нагружения, друг на друга. При этом первый цикл нагружения не всегда совпадал с последующими: на некоторых образцах наблюдалось отклонение кривой, соответствующей первому циклу, от остальных аналогично показанному на рис. 1 поведению гранитного образца на первом цикле нагружения.

В результате проведения серий псевдотрехосных испытаний на образцах горных пород различных литотипов было обнаружено, что введенный параметр напряженного состояния, характеризующий долю критически напряженных трещин в образце, играет роль автомодельного параметра при решении задачи определения связи между эффективным объемным упругим модулем среды и ее напряженным состоянием.

Автомодельность доли растущих трещин позволяет использовать результаты всего нескольких циклов нагружения образца для того, чтобы определить объемный модуль упругости и, соответственно, объемную деформацию для любых значений радиального и осевого напряжений (в области линейной осевой деформации). Таким образом, вместо нескольких значений упругого модуля для различных условий нагружения может быть построена функциональная зависимость между этим модулем и параметрами напряженного состояния. Связь между упругим модулем и напряженным состоянием может быть реализована в качестве поверхности в пространстве  $\sigma_1, \sigma_3, K$ . Наличие автомодельности позволяет параметри-

зовать эту поверхность с помощью единственного параметра — доли критически напряженных трещин — только по результатам серии псевдотрехосных тестов при различных значениях  $\sigma_3$ . В итоге полученный результат позволит определить значение упругого модуля и при других комбинациях главных напряжений, что существенно расширит возможности интерпретации данных псевдотрехосных испытаний для изучения процесса деформирования образцов трещиноватых пород.

### Литература

1. *Kim M. M., Ko H. Y.* Multistage triaxial testing of Rocks // *Geotech. Test. J.* 1979. V. 2. P. 98–105.
2. *Barton C. A., Zoback M. D., Moos D.* 1995. Fluid flow along potentially active faults in crystalline rocks // *Geology.* V. 23(8). P. 683–686.
3. *Dubinya N. V. V.* Critically stressed fractures and their relation to elastic moduli // *Physical and Mathematical Modeling of Earth and Environment Processes.* — Springer, 2018. P. 35–44.

УДК 533.922

### Частотные характеристики сейсмодатчика, плавающего на поверхности воды

*В. В. Шлыков, А. В. Сахаров, С. С. Ефимов, В. М. Агафонов*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Мотивация исследования, выполненного в данной работе, состоит в потребности создания устройств для измерения сейсмических сигналов, ось чувствительности которых автоматически выставляется по направлению местной вертикали. Датчики такого типа могут найти множество применений, в частности, при установке сейсмоприемников на дне водоемов, развертывании систем наблюдений с применением беспилотников, установке сейсмометров на иных планетах. Самым простым и наиболее надежным способом является размещение датчика в колбе, частично заполненной жидкостью таким образом, чтобы датчик плавал на ее поверхности. При этом подбором распределения масс в плавающем датчике можно обеспечить автоматическое выставление оси его чувствительности по вертикали.

Вместе с тем размещение датчика в жидкости приводит к искажениям регистрируемых сейсмических сигналов. Наиболее существенным будут искажения вблизи резонансных частот механической системы, представляющей собой тело, плавающее в жидкости. Для регистрации сигналов без искажений требуется сместить указанную резонансную частоту за пределы полосы регистрируемого сигнала.

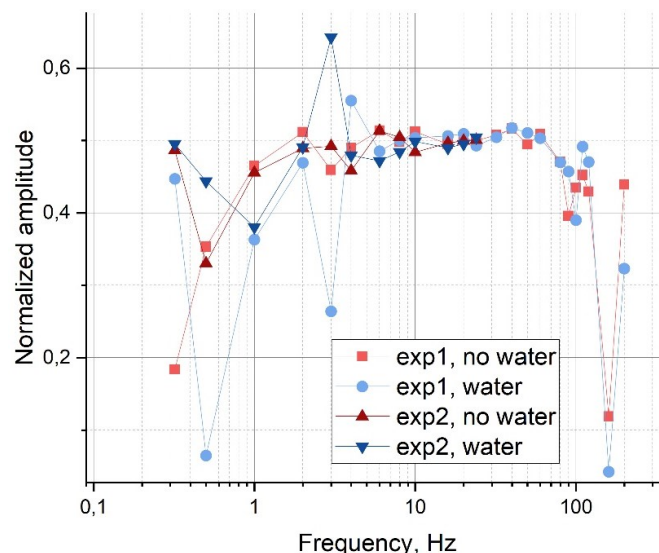


Рис. 1. Амплитудно-частотные характеристики датчика (амплитуда нормирована на амплитуду вибростенда), установленного непосредственно на вибростенде (красная и темно-красная кривые) и плавающего в сосуде, частично заполненном жидкостью (синяя и темно-синяя кривые)

Проведенные в работе экспериментальные исследования включали измерения и сопоставление амплитудно-частотной характеристики одного и того же датчика (использовался акселерометр МТСС-1043А, производство ООО «Р-сенсорс», номер в реестре средств измерений 80158-20) при его размещении на

вибростенде непосредственно на подвижной платформе, а также в сосуде, частично заполненном жидкостью. Было установлено, что полученные характеристики совпадают между собой в значительной части частотного диапазона за исключением частот вблизи 3 Гц, а также в окрестности 100 Гц (рис. 1).

Для интерпретации полученных результатов проводилось моделирование поведения системы в рамках модели, основанной на решении уравнения Навье–Стокса. В отличие от известных задач, связанных с исследованием качки корабля [1, 2], в данном случае принципиально важным было учитывать конечность размеров сосуда, в котором плавает тело. Для упрощения математических преобразований использовано приближение сферического тела, плавающего в центре сферического сосуда (рис. 2). Исследование проводилось в приближении малых чисел Рейнольдса.

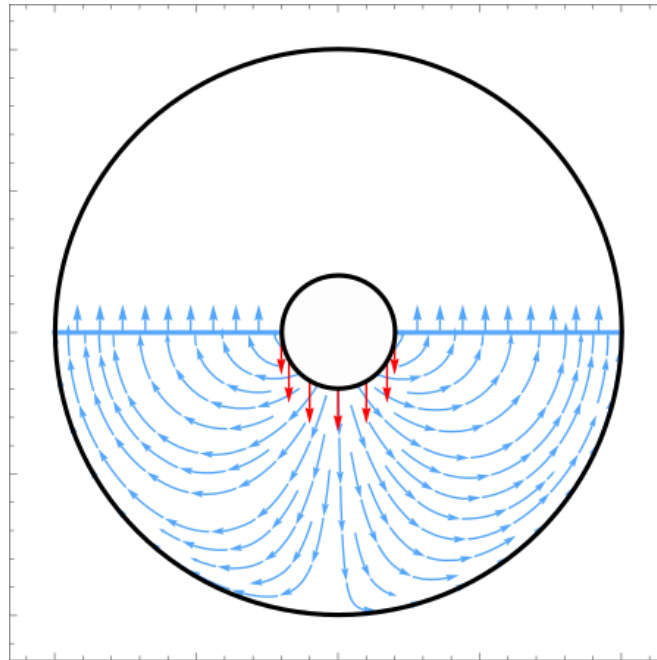


Рис. 2. Результаты моделирования. Распределение гидродинамической скорости в сосуде с водой при вертикальных колебаниях плавающего тела

Результаты моделирования и их сопоставление с экспериментальными данными показывают, что наблюдаемые аномалии в частотных характеристиках могут быть интерпретированы как влияние вертикальных собственных колебаний плавающего тела при одновременном смещении уровня жидкости в направлении, противоположном смещению тела, а также качки тела на поверхности воды. Для получения результатов, количественно соответствующих экспериментальным данным, принципиально важно учитывать присоединенную массу вязкой жидкости, сопровождающую движение тела.

Последующие исследования предполагается направить на уточнение рассматриваемой модели, а также на решение практической задачи изменения конфигурации системы таким образом, чтобы вывести собственные частоты движения, приводящие к искажениям сигналов, за пределы рабочего диапазона частот датчика.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект 22-19-00211.

### Литература

1. *Sharif M. T.* Control techniques applied to integrated ship motion control. Ph. D. Thesis. University of Plymouth, 1995, 344 p.
2. *Ibrahim R. A., Grace I. M.* Modeling of Ship Roll Dynamics and Its Coupling with Heave and Pitch // *Mathematical Problems in Engineering*. 2010. V. 2010: 934714.

## Исследование влияния мелкомасштабной пористости на фильтрационно-емкостные характеристики пористых сред на основе многомасштабных порово-сетевых моделей

*Р. А. Сиразов<sup>1,2</sup>, К. Д. Толстыгин<sup>3,4</sup>, А. Н. Хлюпин<sup>1</sup>, К. М. Герке<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Институт физики Земли имени О. Ю. Шмидта РАН

<sup>3</sup>Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

<sup>4</sup>Почвенный институт им. В. В. Докучаева

Методы моделирования фильтрационно-емкостных характеристик пористых сред в большинстве случаев ограничены вычислительной сложностью алгоритмов. Среды, имеющие многомасштабную структуру порового пространства, например, карбонатные коллекторы и почвы, требуют подхода, позволяющего учитывать пористость различных масштабов.

Рассмотрено моделирование фильтрационно-емкостных характеристик почв на основе многомасштабных порово-сетевых моделей и проведено сравнение с моделью ван Генухтена–Муалема, построенной по точкам экспериментальной кривой водоудержания [1]:

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \frac{1}{[1 + (ah)^n]^{1-1/n}}, \quad (1)$$

где  $S_e$  — объемное содержание воды,  $\theta_r$  и  $\theta_s$  — доля остаточной и насыщенной воды,  $a$  связано с величиной, обратной давлению воздуха, необходимого для заполнения,  $n$  является мерой распределения пор по размерам.

Порово-сетевые модели представляют собой упрощенное представление порового пространства в виде графа, узлы которого являются порами, а ребра — каналами порового пространства. Подобное представление пористой среды позволяет значительно упростить моделирование фильтрационно-емкостных характеристик. В том числе возможно проведение расчетов на больших масштабах чем при прямом численном моделировании многофазных потоков флюидов в пористых средах, а также моделирование пористых сред, размеры пор в которых отличаются на порядки. В данной работе представлены многомасштабные порово-сетевые модели, построенные на основе двух масштабов пористости, отличающихся на 1–2 порядка.

Построение многомасштабной поровой сети состоит из нескольких шагов.

1. Извлечение поровой сети из изображения крупного масштаба с использованием алгоритма, основанного на дискретной теории Морзе [2].

2. Построение мелкомасштабной поровой сети.

3. Построение объединенной поровой сети на основе крупномасштабной с генерацией новых мелкомасштабных элементов по информации, полученной из мелкомасштабной поровой сети.

В дальнейшем проводился расчет кривых водоудержания для поровой сети крупного масштаба, напрямую полученной из КТ-изображения породы и для многомасштабной поровой сети.

Показано, что при расчетах на основе КТ-изображения почв, снятых на одном масштабе, невозможно получить совпадение итоговых кривых водоудержания, так как разрешение КТ-изображений на лучших томографах ограничено величинами порядка 1 мкм [3], в то время как использование многомасштабных порово-сетевых моделей позволяет улучшить совпадение кривых водоудержания.

В рамках работы были построены порово-сетевые модели, включающие в себя неразрешимую средствами компьютерной томографии пористость, и было показано, что добавление информации о неразрешимой пористости приводит к улучшению совпадения кривых водоудержания, полученных экспериментальными методами и методами порово-сетевого моделирования.

### Литература

1. *Van Genuchten M. Th.* A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils // Soil Sci. Soc. Am. J. 1980. V. 44(5). P. 892–898.
2. *Zubov A. S., Murygin D. A., Gerke K. M.* Pore-network extraction using discrete Morse theory: Preserving the topology of the pore space // Phys. Rev. E. 2022. V. 106(5): 055304.
3. *Толстыгин К. Д., Герке К. М., Хлюпин А. Н.* Использование методов исследования нефтесодержащих пород в науке о почве // Науч. конф. молодых ученых и аспирантов ИФЗ РАН, Москва, 09–11 ноября 2022 года. Тезисы докладов. — М.: Ин-т физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН, 2022.

## Возможности применения спектрально-временного анализа для оценки частотно-зависимого затухания по данным мультимодальной сейсморазведки

*А. Д. Яковенко, З. С. Замотина, А. С. Пирогова, М. Ю. Токарев*

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Сейсмоакустические исследования, направленные на идентификацию опасных геологических процессов и явлений (ОГПиЯ) на акватории шельфовой зоны окраинных морей РФ, представляют особый интерес в современной производственной деятельности. Это обусловлено широким распространением в верхней части геологического разреза ОГПиЯ, осложняющих проведение буровых работ, строительство подводных добывающих комплексов и трубопроводов. Наиболее неблагоприятными для бурения являются зоны развития аномально пластового давления, гидратоносные толщи (газовые гидраты), интервалы разреза с повышенной концентрацией газового флюида, разрывные нарушения [1]. Для выявления и получения характеристики различных типов ОГПиЯ, особенно связанных с повышенной концентрацией газа в отложениях, необходимо привлечение анализа частотно-зависимого затухания сигнала при его распространении в исследуемой геологической среде.

Причинами частотно-зависимого затухания сигнала являются поглощение энергии при прохождении в неидеально-упругой среде и ее рассеяние на неоднородностях. Выполнение количественного анализа частотно-зависимого затухания сейсмических волн необходимо для получения дополнительной информации о свойствах горных пород и их флюидонасыщении. Оценка частотно-зависимого затухания может выполняться с использованием различных спектрально-временных преобразований, при помощи которых получают так называемые спектрограммы. Спектрограмма является двумерным представлением сигнала (трассы) в частотно-временной области. Каждая точка на спектрограмме соответствует амплитуде определенной частоты сигнала на определенном временном уровне. Рассчитанные спектрограммы можно использовать для оценки частотно-зависимого затухания сейсмических волн по разрезу, например посредством применения метода спектральных отношений [2] или метода сдвига центральной частоты [3]. Кроме того, существуют подходы для качественного анализа затухания, основанные на атрибутом анализе.

В работе рассматривается подход к изучению частотно-зависимых эффектов на 3D-сейсмических данных МОГТ (метода отраженных волн в модификации общей глубинной точки) стандартного (СР) (частотный диапазон — 5–120 Гц), высокого (СВР) (90–500 Гц) и сверхвысокого (ССВР) (150–750 Гц) разрешения, полученных в рамках опытно-методических работ на акватории Охотского моря. Количественная оценка затухания проводилась с помощью параметра добротности. Добротность может оцениваться методами спектральных отношений, сдвига центральной частоты и другими. Для применения этих методов для каждой трассы необходимо выбрать пару отражений, не осложненных интерференцией, между которыми будет проводиться расчет. На данных 3D-сейсморазведки расчеты проводятся между двумя горизонтами. Для оценки возможности выбора того или иного горизонта с использованием спектрально-временных преобразований строятся спектрограммы, на которых видно влияние интерферирующих отражений. Предлагаемый подход позволяет получать дополнительные характеристики аномальных областей на сейсмических данных, предположительно обусловленных повышенным содержанием газа в отложениях, и повышает достоверность проведенной интерпретации.

В данной работе для оценки добротности был выбран метод сдвига центральной частоты, так как он отличается хорошей устойчивостью относительно других методов. Перед тем как оценить поглощение по данным 3D СР, 3D СВР, 3D ССВР, в первую очередь было необходимо выбрать интервал расчета. С этой целью представлялось целесообразным выявить зоны интерференции, в которых оценка добротности может оказаться некорректной.

Для одной трассы каждого вертикального среза были рассчитаны спектрограммы с помощью преобразования Стоквелла (рис. 1).

На спектрограммах, рассчитанных для разных типов данных, были обнаружены тонкие переслаивания, характеризующиеся «провалами» в спектрах сигналов. На данных 3D СР такие «провалы» привели к невозможности определения добротности с использованием отражений на временных уровнях до 850 мс.

Оценка поглощения была проведена в интервалах от дна до отражающих горизонтов, расположенных ниже целевого газонасыщенного интервала и не подверженных интерференции. Мощность интервалов составила 400 мс (3D СР), 190–200 мс (3D СВР), 160–175 мс (3D ССВР). В результате проведенного анализа были получены следующие значения добротности: 55–200 (по данным 3D СР), 63–200 (по



данным 3D СВР), 61–130 (по данным 3D ССВР). В работе были выбраны отражающие горизонты, отражения от которых не были подвержены интерференции с отражениями от других горизонтов. Тем не менее распределения значений рассчитанной добротности сильно различаются в зависимости от частотного состава набора данных. Если на данных 3D СР различия в оценках затухания можно объяснить изменением выбора временного окна, то на данных 3D СВР и 3D ССВР были выбраны одинаковые временные окна. Это означает наличие нелинейной зависимости затухания от частоты, т. е. параметр добротности в широком диапазоне частот является частотно-зависимым.

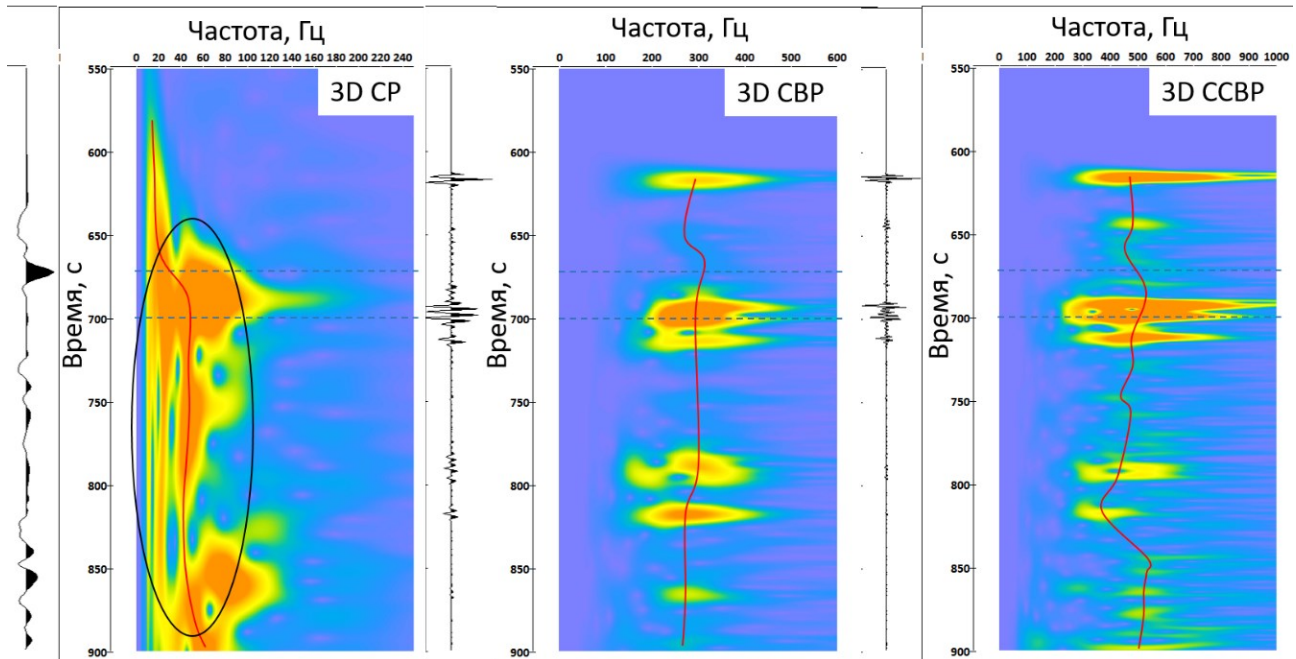


Рис. 1. Спектрограммы, рассчитанные с использованием преобразования Стоквелла, для трасс на вертикальных сейсмических срезах 3D СР, 3D СВР, 3D ССВР. Штриховыми линиями выделен газонасыщенный интервал разреза, красные линии соответствуют пиковым частотам. Черным цветом выделена область, в которой нельзя оценить добротность из-за влияния тонких переслаиваний на двумерный спектр

### Литература

1. Росляков А. Г., Терехина Я. Е., Иванова А. А., Токарев М. Ю., Трифонов А. Н. Выявление геологических опасностей в Карском море по сейсмическим данным // В сб.: Труды Международной геолого-геофизической конференции «ГеоЕвразия 2018. Современные методы изучения и освоения недр Евразии». — Тверь: ПолиПРЕСС, 2018. С. 760–766.
2. Tonn R. The determination of the seismic quality factor Q from VSP data: a comparison of different computational methods // Geophys. Prospect. 1991. V. 39(1). P. 1–27.
3. Quan Y., Harris J. M. Seismic attenuation tomography using the frequency shift method // Geophysics. 1997. V. 62. P. 895–905.

УДК 539.3

### Обоснование математической модели динамического воздействия в задачах сейсмостойкости строительных конструкций

*Н. С. Дюкина, Т. А. Сахаров*

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

Анализ сейсмостойкости строительных конструкций должен, помимо определения колебаний сооружений, включать исследование распространения сейсмических волн в грунте. При математической постановке задачи о сейсмических вибрациях строительных конструкций встает вопрос обоснования модели землетрясения: о расположении источника воздействия и амплитудных характеристиках сейсмических волн. Имеющиеся в распоряжении экспериментальные и синтезированные акселерограммы определяют кинематические характеристики точек поверхности, а для численного исследования сейсмостойкости необходимо

иметь кинематические или силовые условия, при задании которых на границе расчетной области массива грунта вблизи сооружения воспроизводилась бы известная акселерограмма.

Задача определения импульсной нагрузки по сейсмограмме в одной точке поверхности некорректна из-за неопределенности расположения источника землетрясения и, следовательно, неопределенности волнового вектора скорости сейсмических волн. В литературе предлагаются различные варианты моделирования сейсмического воздействия: поверхностные волны [1], плоские волны от кинематических условий на нижней границе массива грунта [2, 3], цилиндрические волны от сдвиговой модели возмущения в гипоцентре [4]. Наиболее простым является задание воздействия на нижней границе — тогда обратная задача восстановления импульса является одномерной [5]. В остальных случаях, помимо задаваемых волн сжатия, растяжения и сдвига, генерируются также поверхностные волны — их вклад в сейсмограмму может быть значителен.

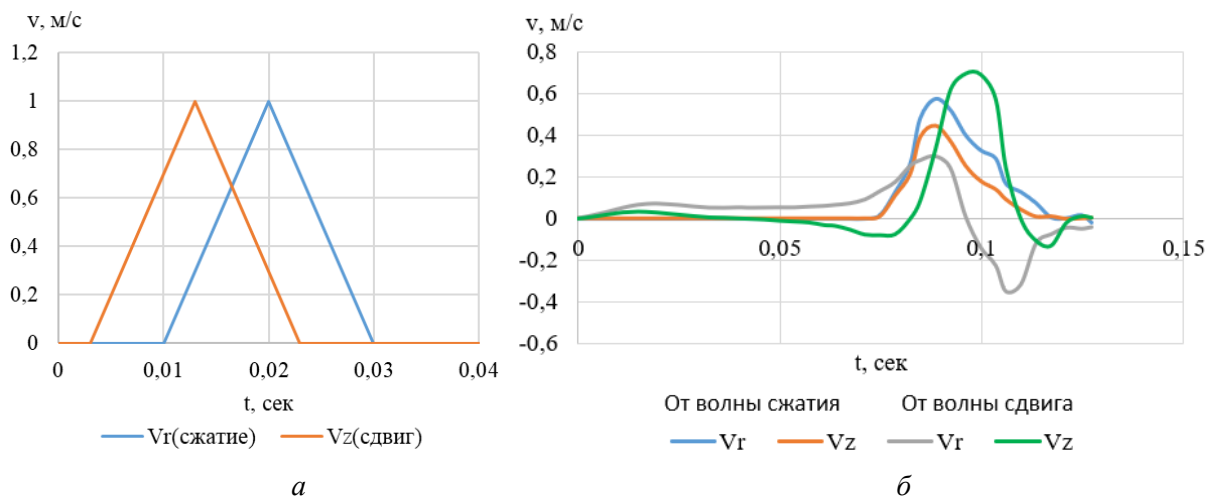


Рис. 1. Результат распространения импульсов вдоль поверхности грунта: *а* — задаваемые импульсы; *б* — результат в центре дневной поверхности грунта

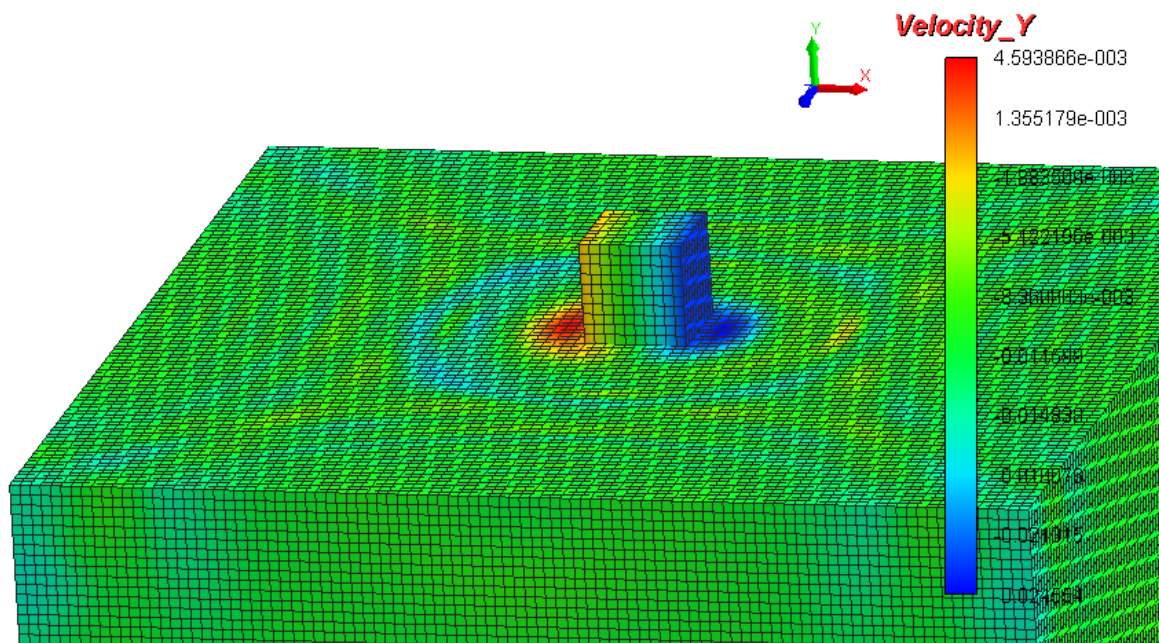


Рис. 2. Вид расчетной области в 3D-расчетах

Для всестороннего анализа колебаний сооружения и выявления наихудшего сценария следует рассмотреть все возможные направления подхода сейсмических волн, решая задачу определения кинематических условий на границе отдельно для каждого варианта. Исследование направлено на формирование кинематических условий от различных источников на границе, учитывающих процессы генерации поверхностных волн и воспроизводящих заданную сейсмограмму в области расположения сооружения.

Численное решение задач проводится в двумерной постановке в программном комплексе «Динамика-2» и в трехмерной постановке в программном комплексе «ЛОГОС. Прочность». На первом этапе решается задача о распространении волн сжатия и сдвига от «удаленного по горизонтали» источника — в этом случае волны задаются на боковой границе массива грунта (рис. 1). По полученному в центре верхней грани комплексному динамическому воздействию из решения одномерной обратной задачи [5] получаем кинематическое воздействие на нижней границе расчетной области грунта — для источника «под сооружением». Полученные сейсмограммы для двух вариантов источников воздействия различаются в точке поверхности не более чем на 2%. Затем выполняется численное моделирование колебаний частично заглубленного сооружения, находящегося в эпицентре и на значительном удалении от эпицентра землетрясения (рис. 2) с использованием определенных ранее кинематических воздействий. В результате численных экспериментов установлены различия в динамике сооружения.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 23-29-00103.

### Литература

1. *Wegner J. L., Yao M. M., Zhang X.* Dynamic wave-soil-structure interaction analysis in the time domain // *Comput. Struct.* 2005. V. 83(27). P. 2206–2214.
2. *Данилов А. Г., Никифоров С. П.* Использование программы Nastran при оценке сейсмических воздействий // *Геофизика на пороге третьего тысячелетия: Сб. науч. тр.* — Иркутск: ИрГТУ, 2001. С. 157–166.
3. *Dyukina N. S., Baranova M. S.* Influence of earthquake hypocenter location on soil-structure dynamic behavior // *Mater. Phys. Mech.* 2016. V. 28(1–2). P. 21–25.
4. *Петров И. Б., Хохлов Н. И.* Моделирование задач 3D-сеймики на высокопроизводительных вычислительных системах // *Мат. моделирование.* 2014. Т. 26(1). С. 83–95.
5. *Ратникова Л. И.* Методы расчета сейсмических волн в тонкослоистых средах. — М.: Наука, 1973.

УДК 550.8.056

## Применение нейронных сетей по результатам лабораторных геомеханических испытаний с целью предсказания напряженно-деформируемого состояния горных пород

*Н. А. Егоров*

ИФЗ РАН, Лаборатория петрофизических и геомеханических исследований (205)

Нейронные сети являются мощным инструментом в области прогнозирования и моделирования, позволяющим предсказывать значения целевых переменных на основе входных данных. Одной из областей, в которых нейронные сети могут быть использованы, является геомеханика — например, применение в восстановлении модуля Юнга в коллекторах с минимальным набором данных геофизических исследований скважин [1].

В данной работе рассматривается использование нейронных сетей для прогнозирования напряженно-деформируемого состояния горных пород на основе результатов геомеханических лабораторных испытаний. Эти испытания могут включать различные методы, такие как испытания на одноосное и объемное сжатие.

В качестве входных данных для нейронной сети использовались временные ряды напряжений и деформаций, полученные в ходе испытаний образцов горных пород, а также их фильтрационно-емкостные свойства.

В данной работе для создания нейронной сети была использована модель, позволяющая создавать последовательные слои нейронной сети, где каждый слой принимает на вход результаты предыдущего слоя. В данной модели было использовано несколько слоев, включая полносвязный слой и слой активации. Данные обрабатывались с помощью метода обратного распространения ошибки, который позволяет оптимизировать веса и смещения нейронов в сети, чтобы минимизировать среднеквадратическую ошибку между предсказанными и фактическими значениями [2].

Одним из преимуществ использования нейронных сетей для прогнозирования напряженно-деформируемого состояния горных пород является возможность предсказать пределы прочности образцов и модули упругости. Эти параметры являются важными при геомеханическом моделировании, так как они позволяют рассчитать устойчивость ствола скважин и определить оптимальную плотность бурового раствора.

Использование нейронных сетей для предсказания напряженно-деформируемого состояния горных пород может быть полезным, так как это может предоставить дополнительную информацию о физико-механических свойствах пород, которые могут быть сложны для измерения в лабораторных условиях. С помощью предсказания предела прочности и упругих модулей горных пород с помощью нейронных сетей можно получить более точные значения для геомеханической модели скважины и более точно рассчитать ее устойчивость. Это может привести к сокращению затрат на бурение и эксплуатацию скважины, а также уменьшению рисков аварийных ситуаций на месторождении.

### Литература

1. *Киндюк В. А.* Восстановление значения модуля Юнга по данным геофизических исследований в скважинах с помощью нейронных сетей, 2013
2. *Галушкин А. И.* Нейронные сети: основы теории / А. И. Галушкин. — М.: РиС, 2014.

УДК 550.831+838

### Совместная интерпретация гравиметрических и магнитометрических данных: проблемы реализации и пути их решения

*А. Н. Левашов<sup>1</sup>, Р. Л. Аргун<sup>1</sup>, А. Г. Ягола<sup>1</sup>, И. Э. Степанова<sup>2</sup>, Д. В. Лукьяненко<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

<sup>2</sup>Институт физики земли им. О. Ю. Шмидта

В работе формулируются условно-вариационные задачи, решением которых является неизвестное распределение масс, магнитных диполей, зарядов и т. п. Такие условно-вариационные задачи сводятся к решению больших и плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений с приближенно заданной правой частью. Особенность подхода заключается в том, что распределение неизвестных гравитирующих масс (или магнитных), зависящее от бесконечного числа параметров, в общем случае восстанавливается достаточно хорошо по конечному набору значений компонент полей в точках сети наблюдений.

Математические модели в магнитостатике, связывающие плотность магнитного момента ограниченного тела и его магнитную индукцию, являются достаточно хорошо известными. Менее известны математические модели магнитостатики, связывающие объемную (или поверхностную) плотность магнитного момента тела с полным тензором градиентов компонент магнитной индукции (ГКМИ), измеряемым в некоторой удаленной от тела области. Модели, включающие тензор ГКМИ, могут быть рассмотрены в различных вариантах: линейных и нелинейных, непрерывных и дискретных, для двумерных и трехмерных магнитных полей. Все эти модели порождают обратные задачи нахождения плотности магнитного момента по тензору ГКМИ в различных постановках задачи.

В работе рассматриваются, прежде всего, соответствующие прямые задачи магнитостатики и гравиметрии. Например, в случае задач магнитостатики мы предполагаем, что среда является парамагнитной, и измерения выполняются в некоторой декартовой системе координат. Если рассматриваются небольшие по площади полигоны (территории, на которых проводятся геофизические исследования), то мы считаем поверхность Земли плоской. Для такого случая выражения для магнитного поля будут выглядеть следующим образом:

$$\mathbf{B}_{\text{field}}(\mathbf{r}_s) = \frac{\mu_0}{4\pi} \iiint_V K_1(\mathbf{r}_s, \mathbf{r}) \mathbf{M}(\mathbf{r}) dV, \quad \mathbf{B}_{\text{tensor}}(\mathbf{r}_s) = \frac{\mu_0}{4\pi} \iiint_V K_2(\mathbf{r}_s, \mathbf{r}) \mathbf{M}(\mathbf{r}) dV,$$

где  $\mathbf{B}_{\text{field}} = [B_x \quad B_y \quad B_z]^T$ ,  $\mathbf{B}_{\text{tensor}} = [B_{xx} \quad B_{xy} \quad B_{xz} \quad B_{yz} \quad B_{zz}]^T$ ,  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ ;  $\mathbf{r}_s = (x_s, y_s, z_s)$ ,

$$K_1(\mathbf{r}_s, \mathbf{r}) = \frac{1}{\rho^5} \begin{bmatrix} 3(x-x_s)^2 - \rho^2 & 3(x-x_s)(y-y_s) & 3(x-x_s)(z-z_s) \\ 3(x-x_s)(y-y_s) & 3(y-y_s)^2 - \rho^2 & 3(y-y_s)(z-z_s) \\ 3(x-x_s)(z-z_s) & 3(y-y_s)(z-z_s) & 3(z-z_s)^2 - \rho^2 \end{bmatrix},$$

$$K_2(\mathbf{r}_s, \mathbf{r}) = \frac{3}{\rho^7} \begin{bmatrix} (x-x_s)[3\rho^2 - 5(x-x_s)^2] & (y-y_s)[\rho^2 - 5(x-x_s)^2] & (z-z_s)[\rho^2 - 5(x-x_s)^2] \\ (y-y_s)[\rho^2 - 5(x-x_s)^2] & (x-x_s)[\rho^2 - 5(y-y_s)^2] & -5(x-x_s)(y-y_s)(z-z_s) \\ (z-z_s)[\rho^2 - 5(x-x_s)^2] & -5(x-x_s)(y-y_s)(z-z_s) & (x-x_s)[\rho^2 - 5(z-z_s)^2] \\ -5(x-x_s)(y-y_s)(z-z_s) & (z-z_s)[\rho^2 - 5(y-y_s)^2] & (y-y_s)[\rho^2 - 5(z-z_s)^2] \\ (x-x_s)[\rho^2 - 5(z-z_s)^2] & (y-y_s)[\rho^2 - 5(z-z_s)^2] & (z-z_s)[3\rho^2 - 5(z-z_s)^2] \end{bmatrix},$$

$$\rho \equiv |\mathbf{r} - \mathbf{r}_s| = \sqrt{(x-x_s)^2 + (y-y_s)^2 + (z-z_s)^2}.$$

Из-за большого объема данных трехмерная инверсия (т. е. решение обратной задачи) высокоточных векторных данных часто требует большого количества вычислительных требований и требует очень много времени. Информация о геометрии, глубине и параметрах извлекается, а трехмерная модель получается путем всестороннего анализа. Работа нацелена на получение достаточной выборки данных путем прямого моделирования различных аномалий — как магнитных, так и гравитационных. Впоследствии мы планируем использовать методы искусственного интеллекта (нейронную сеть) для предсказания каждого параметра.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 32-41-00002.

### Литература

1. *Страхов В. Н., Степанова И. Э.* Метод S-аппроксимаций и его использование при решении задач гравиметрии // Физика Земли. № 7. 2002. С. 3–12.
2. *Ван Я., Колотов И. И., Лукьяненко Д. В., Ягола А. Г.* Восстановление магнитной восприимчивости с использованием полных магнито-градиентных данных // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2020. Т. 60. № 6. С. 1027–1034.

УДК 550.834.05

## Построение модели механических свойств по сейсмическим данным

*Е. А. Роженков*

Российский государственный университет нефти и газа (НИУ) им. И. М. Губкина

Рассмотрен способ построения модели механических свойств (ММС) по комплексу разномасштабных геолого-геофизических данных.

Стандартным подходом к построению ММС в уже пробуренных скважинах является проведение испытаний скважин и геомеханических исследований кернового материала с последующей калибровкой результатов на данные геофизических исследований скважин (ГИС). Непрерывные кривые ГИС позволяют распространить полученные в интервалах испытаний и отбора керна оценки величин напряжений, давлений, упругих и прочностных свойств горных пород по корреляционным связям между динамическими упругими свойствами (рассчитываемыми по кривым  $V_P$ ,  $V_S$  и  $\rho$ ) и статическими (определяемыми в результате лабораторных исследований керна). Также по данным ГИС возможно определить наличие трещин растяжения и вывалов на стенках скважины (и их ширину), что позволяет снизить неопределенность в оценках горизонтальных напряжений [1].

Для решения задачи обеспечения стабильности ствола скважины актуальным является построение ММС вдоль траектории планируемой (еще не пробуренной) скважины. При использовании в качестве эталона ММС, построенных для уже пробуренных скважин, необходимо помнить о латеральной изменчивости упругих свойств. Учесть ее возможно по результатам интерпретации данных сейсморазведки, от которых необходим тот же набор параметров, что и от данных ГИС, — кривые  $V_P$ ,  $V_S$  и  $\rho$  (рис. 1). Однако получение надежных оценок данных параметров по данным сейсморазведки затруднено, довольно часто оценки упругих свойств ограничиваются наличием низкоразрешенной кривой интервальной скорости ( $V$ ) и кривой акустического импеданса ( $I_P$ ), реже — совместно с кривой поперечного импеданса ( $I_S$ ).

В работе показано, что все компоненты ММС возможно оценить только по двум параметрам, получаемым в результате сейсмической амплитудной инверсии ( $I_P$  и  $I_S$ ), вместо трех ( $V_P$ ,  $V_S$  и  $\rho$ ). В табл. 1

представлены примеры расчета динамических упругих свойств, прочностных свойств и главных напряжений через распределения продольного и поперечного импедансов.

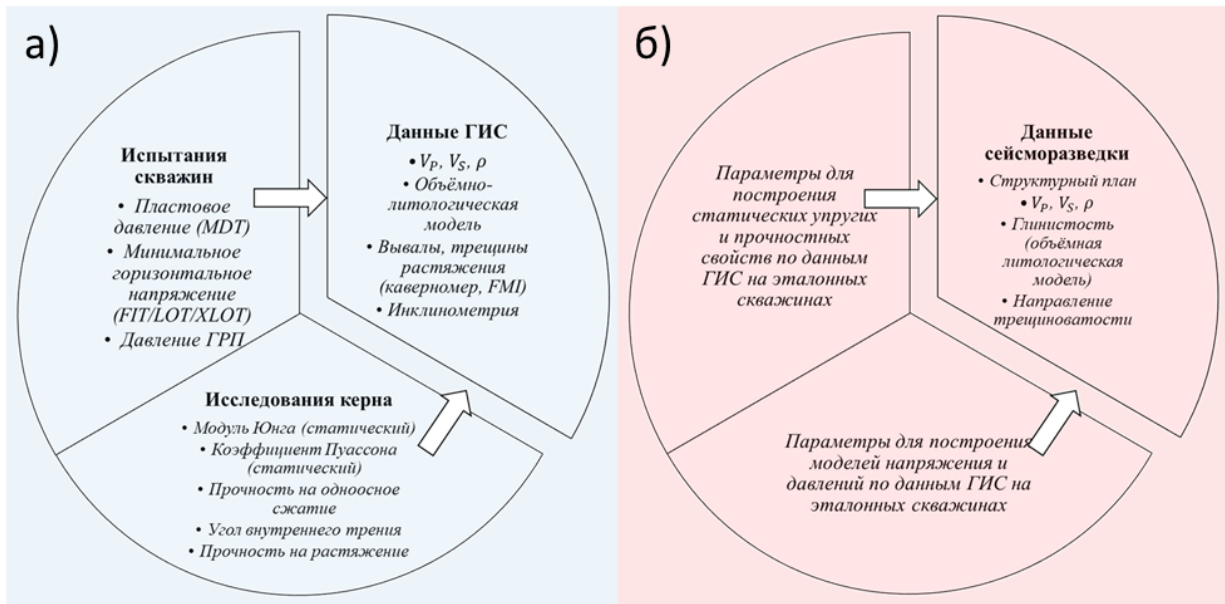


Рис. 1. Схема построения ММС: а — по данным ГИС; б — по данным сейсморазведки

Т а б л и ц а 1. Уравнения для расчета ММС в параметризации  $V_p, V_s, \rho$  и  $I_p, I_s$

Параметризация	$V_p, V_s, \rho$	$I_p, I_s$
Компоненты ММС		
$E_{st}$	$E_{dyn} = \rho V_s^2 \frac{3V_p^2 - 4V_s^2}{V_p^2 - V_s^2}$	$\rho E_{dyn} = I_s^2 \frac{3I_p^2 - 4I_s^2}{I_p^2 - I_s^2}$
$\nu_{st}$	$\nu_{dyn} = \frac{1(V_p/V_s)^2 - 2}{2(V_p/V_s)^2 - 1}$	$\nu_{dyn} = \frac{1(I_p/I_s)^2 - 2}{2(I_p/I_s)^2 - 1}$
$UCS$	$0,77 \cdot V_p^{2,93}$ [2]	$a \cdot I_p^b$
$TS$	$a \cdot UCS$ ( $a \sim 0,1$ )	$a \cdot UCS$ ( $a \sim 0,1$ )
$\varphi$	$\arcsin\left(\frac{V_p - 1000}{V_p + 1000}\right)$ [3]	$\arcsin\left(\frac{I_p - A}{I_p + A}\right)$
$S_v$	$\sum_{z_0}^z \rho_i \cdot g \cdot \Delta z$	$\sum_0^t I p_i \cdot g \cdot \Delta t$ [4]
$P_p$	$f(V, \rho)$	$f(I_p)$ [5]
$S_h, S_H$	$f(S_v, P_p, E_{st}, \nu_{st}, \varepsilon_h, \varepsilon_H)$	$f(S_v, P_p, E_{st}, \nu_{st}, \varepsilon_h, \varepsilon_H)$

Здесь  $V_p$  — скорость продольной волны,  $V_s$  — скорость поперечной волны,  $\rho$  — плотность,  $I_p$  — продольный импеданс,  $I_s$  — поперечный импеданс,  $E_{st}$  — статический модуль Юнга,  $E_{dyn}$  — динамический модуль Юнга,  $\nu_{st}$  — статический коэффициент Пуассона,  $\nu_{dyn}$  — динамический коэффициент Пуассона,  $UCS$  — прочность на одноосное сжатие,  $TS$  — прочность на растяжение,  $\varphi$  — угол внутреннего трения,  $S_v$  — вертикальное напряжение,  $g$  — ускорение свободного падения,  $\Delta z$  — шаг дискретизации по глубине,  $\Delta t$  — шаг дискретизации сейсмической записи,  $P_p$  — поровое давление,  $V$  — скорость упругой волны,  $S_h, S_H$  — горизонтальные напряжения,  $\varepsilon_h, \varepsilon_H$  — тектонические деформации,  $a, b, A$  — эмпирические коэффициенты.

Предлагаемый подход позволяет уйти от необходимости оценок  $V_P$ ,  $V_S$  и  $\rho$  и связанных с ними погрешностей при использовании сейсмических данных для построения ММС.

### Литература

1. *Zoback M., Mastin L., Barton C.* In-situ stress measurements in deep boreholes using hydraulic fracturing, wellbore breakouts, and stonely wave polarization // ISRM International Symposium Proceedings. — Centek: Lulea, 1986. P. 289–299.
2. *Horsrud P.* Estimating mechanical properties of shale from empirical correlations // SPE Drill. Complet. V. 16(2). 2001. P. 68–73.
3. *Lal M.* Shale Stability: Drilling Fluid Interaction and Shale Strength // J. Pet. Technol. 1999. V. 51(11): 30.
4. Patent No. 2627766 Canada. Method for quantitative evaluation of fluid pressures and detection of overpressures in an underground medium; Filing date 2006.11.13; Publication date 2007.05.24 / P. Rasolofosaon, T. Tonellot, 4 p.
5. *Роженков Е. А., Данько Д. А., Шубин А. В., Рыжков В. И.* Методика прогнозирования порового давления по результатам сейсмической амплитудной инверсии // Геофизика. 2022. № 1. С. 24–30.

УДК 550.3

## Развитие проницаемости в образцах горных пород в процессе разрушения на основе лабораторных экспериментов

*Д. С. Сергеев*

ИФЗ РАН, Лаборатория физики землетрясений и неустойчивости горных пород (301)

Выявление взаимосвязей между процессами разрушения и развития проницаемости в динамике представляет существенный интерес для изучения закономерностей различных переходных режимов сейсмического процесса и прояснения их физической природы [1].

С этой целью проведены лабораторные эксперименты по исследованию развития проницаемости образцов осадочных и вулканогенных горных пород (на стандартных образцах керна диаметром 30 мм и высотой 60 мм) при всестороннем сжатии и одноосном нагружении от начала нагружения до разрушения. Все образцы были предварительно полностью насыщены флюидом. Значения проницаемости вычислялись на основе закона Дарси в предположении ламинарности потока флюида.

Эксперименты осуществлялись на сервогидравлической установке высокого давления GCTS RTR 4500 в лаборатории 205 ИФЗ РАН.

В ходе экспериментов проводились непрерывные измерения проницаемости образцов горной породы методом стационарного потока флюида при градиенте давления фильтрующейся жидкости 1 МПа, непрерывная запись акустической эмиссии, измерение осевой, радиальной и объемной деформации, скоростей продольной и поперечных волн на частоте 1 МГц, давления в камере и осевой нагрузки. Использовались различные режимы нагружения образцов горной породы.

Выявлены закономерности развития проницаемости в исследуемых горных породах, а именно:

изменение проницаемости возникает при появлении и развитии микротрещиноватости при ступенчатом нагружении образца;

наибольшие значения проницаемости достигаются в момент возникновения макротрещины в образце;

заметное увеличение акустической активности в образце возникает на участке перехода от упругого к неупругому деформированию, пик активности достигается в момент разрушения, при этом наблюдается хорошая корреляция с изменением проницаемости [2];

процесс изменения проницаемости отражается в изменении отношения скоростей продольной и поперечной волны в испытанных образцах [3].

Лабораторные исследования выполнены на оборудовании Центра коллективного пользования ИФЗ РАН в рамках государственного задания ИФЗ РАН.

### Литература

1. *Смирнов В. Б., Пономарев А. В.* Физика переходных режимов сейсмичности. — М.: РАН, 2020.
2. *Пономарев А. В.* [и др.]. Эволюция проницаемости горных пород в процессе разрушения // Триггерные эффекты в геосистемах. VI Международная конференция. Москва, 21–24 июня 2022 г. [https://conf2022.idg.ras.ru/docs/articles/0442\\_rus.pdf](https://conf2022.idg.ras.ru/docs/articles/0442_rus.pdf) (дата обращения 13.03.2023).

3. Пономарев А. В. [и др.]. Изменение проницаемости горных пород при подготовке разрушения // Физико-химические и петрофизические исследования в науках о Земле. Двадцать третья международная конференция. Москва, 26 сентября—2 октября 2022 г. Борок, 30 сентября 2022 г. Материалы конференции. — М.: ИГЕМ РАН, 2022. С. 204–207.

УДК 550.8.052

### **Особенности строения и происхождения палеодолин и палеодепрессий Восточно-Приновоземельского района Карского моря по данным сейсмоакустических исследований**

**З. С. Замотина<sup>1</sup>, А. В. Старовойтов<sup>1</sup>, М. Ю. Токарев<sup>1</sup>, Я. Е. Терехина<sup>1</sup>, А. А. Колубакин<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

<sup>2</sup>РН Эксплорейшн

Подводные долины Карского шельфа являются объектом исследований ученых, начиная со второй половины XX века. Интерес к этим формам рельефа вызван в первую очередь тем, что они представляют собой «чувствительные» геоморфологические системы, реагирующие на изменение палеогеографических условий, в том числе климата и тектонического режима. Их изучение является важным для восстановления событий геологического прошлого. Во вторую очередь они относятся к опасным геологическим процессам и явлениям, которые необходимо учитывать при строительстве подводной инфраструктуры и проведении буровых работ. Палеодолины и палеодепрессии на территории Карского моря рассматривались в работах А. Г. Ласточкина [1], Е. Е. Мусатова [2] и др. Авторы перечисленных работ создали схемы палеодолин, которые были основаны на морских навигационных картах, не являющихся аналогом топографических, редких сейсмоакустических профилях (в большинстве случаев при их отсутствии) и крайне ограниченных сведениях о вещественном составе донных отложений.

В настоящей работе показаны результаты анализа данных 2D-сейсморазведки стандартного разрешения (2D СР) метода отраженных волн в модификации общей глубинной точки (МОВ-ОГТ), плотной сетью покрывающих Восточно-Приновоземельский район Карского моря. Кроме того, на отдельных участках проведен анализ данных 2D-сейсморазведки высокого (2D СВР) и сверхвысокого (2D ССВР) разрешения. По совокупности имеющихся данных проведен детальный анализ особенностей внутреннего строения, пространственного положения палеодолин и палеодепрессий и сделаны предположения об их генезисе.

В северной части района исследования по данным 2D СР выделяется палеодолина, врезанная в сейсмокомплекс, представленный отложениями предположительно палеоценового возраста [3]. Она вытянута с северо-запада на юго-восток, имеет ширину от 3 до 5 км и протяженность около 157 км. Глубина залегания тальвега палеодолины изменяется от 220 м до 415 м ниже уровня дна (н. у. д.). Осадочное выполнение погребенной долины, представленное отложениями предположительно плиоцен-четвертичного возраста [3], характеризуется мощностью около 400 м (при скорости распространения продольных волн — 1600 м/с) и имеет сложное строение. На северо-западе в нижней части палеодолины наблюдается хаотическая волновая картина, сменяющаяся вверх по разрезу слоистой с признаками деформации слоев (рис. 1а). В верхней части палеодолины выделяются наиболее молодые палеопонижения с хаотическим типом волновой картины и мощностью выполняющих отложений от 70 до 120 м (рис. 1а). Под погребенной долиной также наблюдается отрицательный скоростной эффект, вероятно, связанный с залеганием мягких (слабоконсолидированных) осадков (рис. 1а). На юго-востоке внутреннее строение погребенной долины изменяется, что выражается в появлении акустически прозрачного тела с прямой полярностью отражений в его кровле и обратной полярностью в подошве, что предположительно указывает на залегание многолетнемерзлых грунтов в отложениях, выполняющих палеодолину (рис. 1б). Данное тело обнаружено в интервале глубин от 80 до 170 м н. у. д. при глубине воды около 190 м. Выше по разрезу палеодолина перекрыта комплексом более молодых слоистых отложений (рис. 1б). Необходимо также отметить, что на некоторых участках прослеживаются разрывные нарушения, к которым она приурочена. Кроме того, в бортах палеодолины выделены террасовидные ступени, что, вероятно, связано с несколькими этапами врезания.

На северо-западе, севере, востоке и юго-востоке района работ при глубине воды от 40 до 150 м выявлены палеопонижения с мощностью залегания отложений от 150 до 190 м. Волновая картина выполняющих отложений акустически прозрачная. В основании палеопонижений наблюдается обратная



полярность отражений. Под ними также прослеживается положительный скоростной эффект, что указывает на присутствие многолетнемерзлых грунтов в отложениях, выполняющих их. Одним из возможных объяснений наличия признаков залегания многолетнемерзлых грунтов в палеопонижениях является промерзание отложений в предшествующие эпохи оледенения (в максимум последнего оледенения, 18–25 тыс. лет назад?). Деформации слоев в верхней части осадочного выполнения, вероятно, связаны с просадкой грунта в результате вытаивания мерзлых грунтов на этапе морской (голоценовой?) трансгрессии.

В районе Восточно-Новоземельского желоба, при глубинах воды около 300 м, обнаружено линейное палеопонижение, вытянутое с юго-запада на северо-восток. Его протяженность составляет около 40 км, ширина в плане — от 3,5 до 6 км. Мощность выполняющих отложений изменяется от 85 до 130 м. В поперечном сечении палеопонижения наблюдается относительно выровненная форма дна. Углы наклона бортов составляют около 7°. Волновая картина внутри погребенного понижения акустически прозрачная. Выше по разрезу наблюдается аккумулятивное тело, характеризующееся неровной выпуклой кровлей и хаотической волновой картиной с ярко-выраженным высокоамплитудным субгоризонтальным отражением в основании. Данные структурно-морфологические признаки и четвертичный возраст осадков, выполняющих палеопонижение [3], предположительно указывают на наличие ледниковых и ледниково-морских отложений. На основе существующих представлений о распространении ледникового покрова в позднечетвертичное время в районе работ сделано предположение, что выделенное палеопонижение имеет ледниковый генезис.

На основе проведенного исследования получены новые сведения о внутреннем строении палеодолин и палеодепрессий, уточнено их пространственное положение, выделено несколько временных генераций, предположительно образованных в разные этапы регрессии плиоцен-четвертичного времени. На основе этого значительно уточнены существующие геоморфологические схемы, отражающие положение не только палеопонижений, выраженных в современном рельефе дна, но и погребенных под современными осадками.

Авторы выражают благодарность А. Г. Рослякову и А. Е. Рыбалко за консультацию в процессе написания работы.

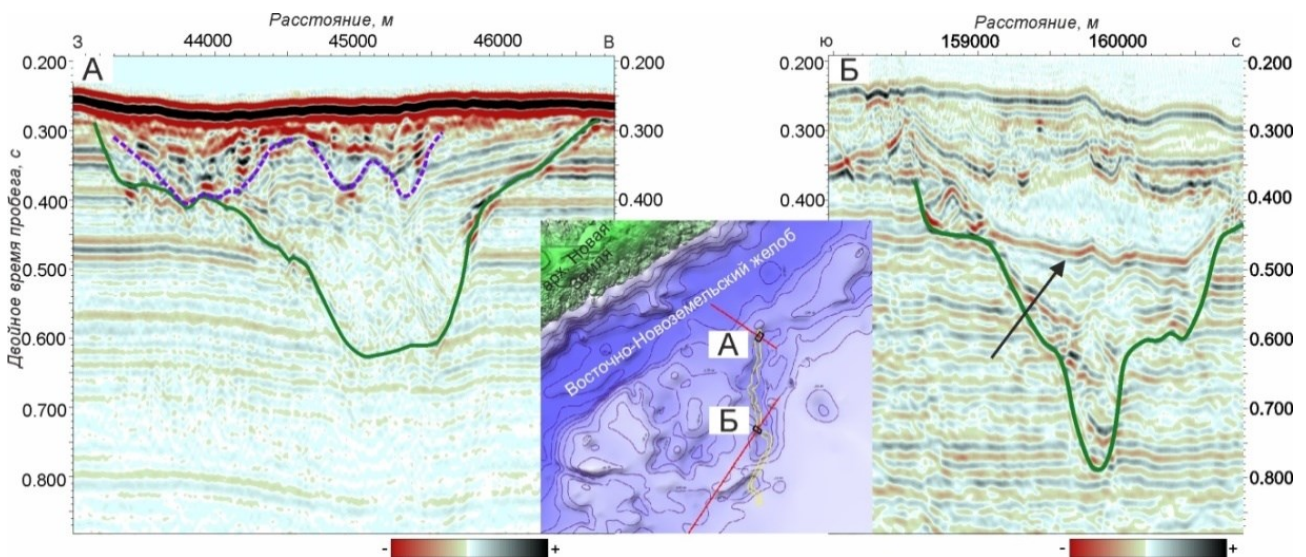


Рис. 1. Пример палеодолины, выделенной по данным 2D СР (показана зеленой линией). Фиолетовая штриховая линия ограничивает палеопонижения более молодой генерации. Черная стрелка соответствует подошве предположительно мерзлых грунтов. На врезке показаны положения фрагментов профилей в районе работ

## Литература

1. Ласточкин А. Н. Подводные долины северного шельфа Евразии // Известия Всесоюзного географического общества 1977. Т. 109. № 5. С. 412–417.
2. Мусатов Е. Е. Классификация речных палеодолин Баренцево-Карского шельфа в новейшее время // Тезисы докладов 2-й Всесоюзной конференции «Проблемы четвертичной палеоэкологии и палеогеографии северных морей». — Апатиты: АН СССР, 1987. С. 79–80.
3. Государственная геологическая карта Российской Федерации. Масштаб 1:1 000 000 (новая серия). Лист S41-43. — о. Белый. Объяснительная записка. — Санкт-Петербург: ВСЕГЕИ, 2004.

## Исследование зависимости амплитудно-частотной характеристики и чувствительности от глубины погружения высокочувствительного молекулярно-электронного гидрофона с системой компенсации внешнего гидростатического давления

Я. А. Гордеев<sup>1</sup>, Д. Л. Зайцев<sup>1</sup>, Е. В. Агафонова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup>Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана  
(национальный исследовательский университет)

Разработана конструкция молекулярно-электронного гидрофона, обеспечивающая компенсацию внешнего гидростатического давления рис. 1. В процессе разработки макета устройства был выполнен расчет необходимых и оптимальных прочностных характеристик упругих элементов конструкции, в частности торцевых металлических мембран гидрофона, в целях соответствия разработанной конструкции возможности выдерживать значительные статические давления до глубин 200 м и обеспечивающих максимально возможную чувствительность прибора. В качестве предельной заявленной глубины выбрано усредненное значение глубины шельфа, данная же конструкция позволяет обеспечить стабильную работу на любой глубине, благодаря реализованной системе компенсации гидростатического давления и предельная рабочая глубина ограничена только выбранным материалом корпуса и устойчивостью соединений к протечкам. Зависимость необходимой толщины мембраны от характеристик использованного материала определяется формулой

$$h = 2\pi R^4 \frac{(1-\mu) \Delta P}{E \Delta V}, \quad (1)$$

где  $\mu$ ,  $E$  — коэффициент Пуассона и модуль Юнга, определяющие характеристики выбранного материала,  $\Delta P$  — гидростатическое давление, действующее на мембраны гидрофона,  $R$  — радиус сферы, используемой для приближения поверхности мембраны, деформированной гидростатическим давлением,  $\Delta V$  — изменение объема преобразователя, заполненного электролитом KI ( $I_2$  0,03%), вызванное гидростатическим давлением, электролит выбран таким образом, чтобы его состав не менялся в процессе работы в течение долгого времени [2]. Построенные с использованием программного обеспечения АВАСУС.САЕ и Ansys 2021R2 численные модели подтверждают результаты, полученные аналитически по формуле (1). Сравнительный анализ АЧХ с ранее разработанными техническими решениями приведен на рис. 2, подтверждающий теоретические выводы о влиянии жесткости механической системы на форму АЧХ и чувствительность гидрофона. Проведенный сравнительный анализ зависимости АЧХ предложенного гидрофона от глубины погружения показывает независимость АЧХ от глубины погружения прибора, что не могут обеспечить ранее разработанные конструкции гидрофонов [1, 3]. Изготовленные опытные образцы гидрофона успешно справляются с задачей компенсации внешнего гидростатического давления, что позволяет сделать вывод о стабильности АЧХ прибора при глубине погружения до 200 м.

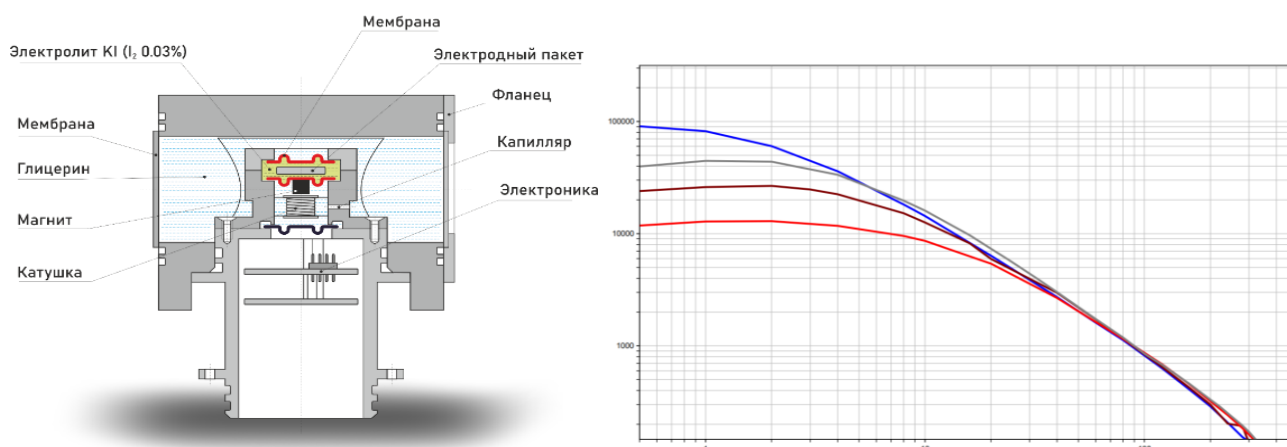


Рис. 1. Блок-схема МЭ гидрофона

Рис. 2. АЧХ различных конструкций гидрофонов: коричневый — текущий гидрофон, синий — конструкция № 1; серый — конструкция № 2, красный — конструкция № 3

Таким образом, предложенная конструкция глубоководного МЭ-гидрофона способна обеспечить стабильную высокую чувствительность, не зависящую от глубины погружения.

Работа выполнена в рамках проекта «Разработка и создание аппаратно-программного модульного регистрирующего комплекса с гибридной телеметрией для проведения наземной и морской сейсморазведки и сейсмического мониторинга», поддержанного Минобрнауки РФ, соглашение 075-11-2022-030 от 08.04.2022.

### Литература

1. *Zaitsev D., Avdyukhina S., Ryzhkov M., Evseev I., Egorov E., Agafonov V.* Frequency response and self-noise of the MET hydrophone // *J. Sens. Sens. Syst.* 2018. V. 7. P. 443–452. DOI: 10.5194/jsss-7-443-2018.
2. *Агафонов В. М., Бугаев А. С.* [и др.]. Устройство и принцип действия молекулярно-электронного гидрофона // Доклады Академии наук, 2018.
3. *Egorov E. V., Shabalina A. S., Zaitsev D. L., Velichko G.* Low frequency hydrophone for marine seismic exploration systems // *Sensors and Electronic Instrumentation Advances. Proc. 5-th Int. Conf. Sens. Electron. Inst. Adv. (SEIA)*, 25–27 Sept. 2019. P. 69–70.

УДК 550.8.056

### Восстановление истории изменения напряженно-деформированного состояния образцов горных пород по данным о распределении и свойствах естественных трещин

*Д. Д. Ермолович*

ИФЗ РАН, Лаборатория фундаментальных проблем нефтегазовой геофизики и геофизического мониторинга (202)

В работе изучается вопрос неоднородности напряженно-деформированного состояния (НДС) и упругопластических свойств горных пород околоскважинной зоны по данным о естественной трещиноватости, а также восстановление истории изменения НДС горных пород на основании лабораторных прочностных тестов и распределении естественных трещин.

Для изучения напряженно-деформированного состояния и происходящих в нем геомеханических процессов, а также для разработки эффективных методов управления ими важно знать механические свойства горных пород и особенно их прочность. Поэтому образцы для прочностных тестов должны быть достаточно большими, чтобы содержать достаточное количество зерен, но в то же время достаточно малыми, чтобы исключить любой серьезный структурный разрыв. Точнее, рекомендуется, чтобы диаметр образца был более чем в 10 раз больше диаметра самого крупного зерна породы [1].

Отношения между напряжениями и деформациями определялись на основании проведенных тестов на трехосное сжатие, где образец подвергается осевому сжатию с равномерным радиальным напряжением путем насыщения породы жидкостью. Таким образом, поле наложенных напряжений определяется осевым напряжением  $\sigma_a$ , всесторонним давлением  $p_c$  и поровым давлением  $p_p$ . Эта нагрузка связана с деформированным состоянием, определяемым осевой деформацией  $\epsilon_a$  и радиальной деформацией  $\epsilon_r$ . Образование трещин в пластах в значительной мере обусловлено полями напряжений в породе. В трещиноватом пласте поле напряжений является анизотропным, а сами трещины способны отражать напряженно-деформированное состояние в пласте [2].

Для тестов использовались карбонатные горные породы, так как оценка трещиноватости в них является ключевым показателем к увеличению нефтеотдачи и позволяет бурить наклонные или горизонтальные скважины так, чтобы их ствол проходил, по возможности, перпендикулярно плоскости трещин. Скважина, пробуренная в таком направлении в породе с низкой проницаемостью, будет пересекать большее количество трещин и будет иметь более высокий дебит, в сравнении со скважиной, пробуренной в направлении, параллельном относительно трещиноватости [3].

На основании проведенных тестов на трехосное сжатие были построены графики девиаторных и осевых напряжений, а также рассчитаны эффективные напряжения, действующие на образцы в процессе тестов. В дальнейших планах реконструкция направлений главных напряжений, расчет напряжений для синтетических трещин из распределения Фишера для разных кучностей, а также учет нелинейности и расчет кейсов для горизонтальных скважин.

### Литература

1. *Nauroy J.-F.* Geomechanics applied to the petroleum industry. — Paris: Editions Technips, 2011.

2. *Fjær E., Holt R. M., Horsrud P., Raaen A. M., Risnes R.* Petroleum related rock mechanics. — Amsterdam: Elsevier, 1992.
3. *McLellan P. J.* Assessing the Risk of Wellbore Instability in Horizontal and Inclined Wells // *J. Can. Pet. Technol.* 1996. V. 35(2).

УДК 550.831.015

## Способы улучшения данных глобальных спутниковых моделей гравитационного поля Земли на акваториях с использованием априорной съемочной информации

*П. С. Михайлов*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН (ИФЗ РАН)

<sup>2</sup>Владимирский государственный университет им. А. Г. и Н. Г. Столетовых

Возможности использования данных об аномалиях силы тяжести, представленных в глобальных моделях, определяются их точностью и разрешающей способностью. Важными особенностями современных моделей гравитационного поля Земли (ГПЗ) являются их пространственная неравноточность и неодинаковое фактическое разрешение данных, это обусловлено комбинацией разных средств и методов получения данных о ГПЗ и аппаратом их объединения. На акваториях основным средством получения данных в средних и коротких длинах волн аномалий (до 50 км) является спутниковая альтиметрия. Поэтому точность модельных данных в Мировом океане и, соответственно, перспективы их применения зависят от возможностей, ограничений и особенностей обработки метода альтиметрии.

Одной из основных источников погрешностей, возникающих в процессе обработки альтиметрии, является фильтрация входящей информации. В альтиметрических измерениях обрабатывается сложный отраженный сигнал, характер которого очень чувствителен к качеству подстилающей поверхности, поэтому в таких данных неизбежен шум, связанный с большим количеством факторов. Для его сглаживания используются специальные фильтры, настраиваемые по локальным характеристикам подстилающей поверхности и самого поля [1]. Применение такой фильтрации подавляет высокочастотные составляющие модельных аномалий и снижает достоверность данных. На больших градиентах поля такой эффект проявляется в большей степени.

Проведенное исследование по масштабному сравнению современных глобальных моделей с высокоточными гравиметрическими съемками в разных акваториях Мирового океана выявили прямую зависимость точности моделей от величины горизонтального градиента аномального поля, а также показали фактическую точность современных моделей [2]. Самой достоверной моделью на большинстве акваторий в настоящее время является модель Sandwell and Smith v29.1 [3]. Точность этой модели, полученная как СКО относительно морских площадных гравиметрических съемок, варьируется от 0,7 мГал на абиссальных равнинах до 3,5 мГал на сильно градиентных структурах, таких как Срединно-океанические хребты. Точность в пределах 1 мГал доступна в моделях только на структурах с градиентом поля менее 2 мГал/км. По оценкам [2] таких областей в Мировом океане более 80%. Поэтому в данной работе отдельно рассматриваются особенности модельного аномального поля и потенциальные возможности его улучшения на участках с градиентом поля менее 2 мГал/км и отдельно на участках с большими его градиентами.

Морская гравиметрическая съемка — это наиболее точный, но и достаточно дорогостоящий способ определения ГПЗ. Зачастую сплошная съемка интересующей площади не может быть выполнена сетью близко расположенных профилей (галсов), однако инструментальные измерения в пределах этой площади присутствуют. Принимая во внимание стандартный способ обработки спутниковой альтиметрии в рамках одной модели, который предполагает подбор параметров обработки на достаточно большой регион, можно предположить, что вся интересующая площадь или геоморфологическая структура представлена в этой модели с одинаковыми параметрами обработки и содержит одну систематическую погрешность. Данная погрешность может быть выявлена на измеренных профилях и учтена в модельных данных и, таким образом, получена улучшенная локальная модель ГПЗ.

На абиссальных равнинах (градиент поля 2 мГал/км и менее) модельная точность считается наилучшей, однако при анализе модельных данных вдоль съемочных профилей в разных акваториях в этих данных выявлен короткопериодный шум в диапазоне от 15 до 20 км. Типовой график зависимости амплитуды сигнала в съемке и в модели от длин волн аномалий показан на рис. 1. Выделенная в модельных данных полоса шума позволяет применить к ним полосовой фильтр, исключить помеху и улучшить

модельные данные вдоль одного профиля и на полигоне в целом. При практическом применении данного способа точность модели Sandwell and Smith v29.1 на тестовом полигоне (район Индийского океана) после одной такой фильтрации возросла по СКО с 1,09 мГал до 0,83 мГал.

Иначе чем на абиссальных выгрядах проблематика использования модельных аномалий в градиентных районах: амплитуды высоких частот реальных аномалий в моделях подавлены. Несмотря на то, что каждая последующая модель содержит больший набор входящих альтиметрических данных и, соответственно, лучше описывает локальные аномалии, для более эффективного практического использования модельных аномалий в этих областях необходимо дополнительное восстановление их амплитуд и высоких частот.

На рис. 2 показано модельное ГПЗ (Sandwell and Smith v29.1) полигона, расположенного на Срединно-океаническом хребте (Индийский океан). Была выполнена детальная морская съемка этого полигона и на рис. 2 также показаны 4 тестовые профили из этой съемки. На рис. 3 показаны графики зависимости разниц «съемка–модель» по тестовым линиям от длин волн аномалий, полученные в рамках спектрального анализа данных, и выделен диапазон частот с повышенными отклонениями на всех тестовых профилях. Таким способом были определены наиболее подавленные в результате обработки альтиметрии частоты реальных аномалий. Из-за потенциального отсутствия данных о погрешностях модели на всем полигоне и невозможности выполнить восстановление всех частот, наиболее оптимальным здесь является применение высокочастотного фильтра Баттерворта к выделенному общему для всех имеющихся тестовых данных частотному диапазону с максимальными модельными погрешностями. Чем больше тестовых данных включено в спектральный анализ, тем достоверней можно определить данный диапазон, а впоследствии получить более качественную оценку результата улучшения модельных данных.

При практическом применении данного способа точность модели Sandwell and Smith v29.1 на данном полигоне с наиболее сложной структурой аномального поля после выполнения процедуры восстановления высоких частот и коррекции модельных аномалий точность вновь созданной локальной модели возросла по СКО с 3,05 мГал до 1,77 мГал.

Таким образом, показана принципиальная возможность получения локальных моделей ГПЗ с улучшенными точностными характеристиками с использованием открытых глобальных данных и ограниченного количества съемочной информации. Такой подход может лежать в основе нового принципа сбора гравиметрической информации на акваториях, основанного на верификации модельных данных об аномалиях ГПЗ и их комплексировании с данными морских и аэрогравиметрических съемок.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках гранта № 22-17-20035.

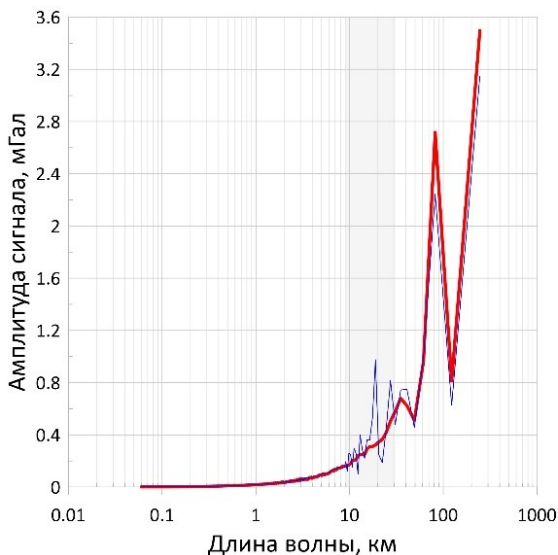


Рис. 1. Графики зависимости амплитуды сигнала в съемочных данных (красная линия) и модельных данных Sandwell and Smith v29.1 (синяя линия) на абиссальном участке Индийского океана. Серой областью выделен диапазон высокочастотной помехи в модельных данных

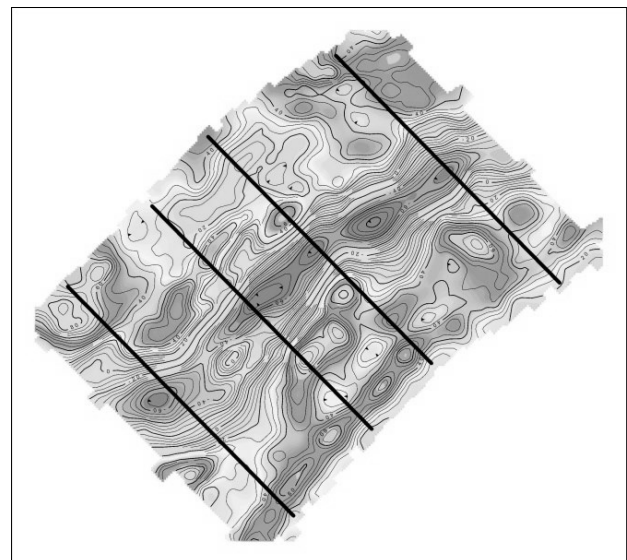


Рис. 2. Модельное поле Sandwell and Smith v29.1 на полигоне над Срединно-океаническим хребтом. Линиями показаны тестовые съемочные профили, используемые для оценки коррекции модельных данных

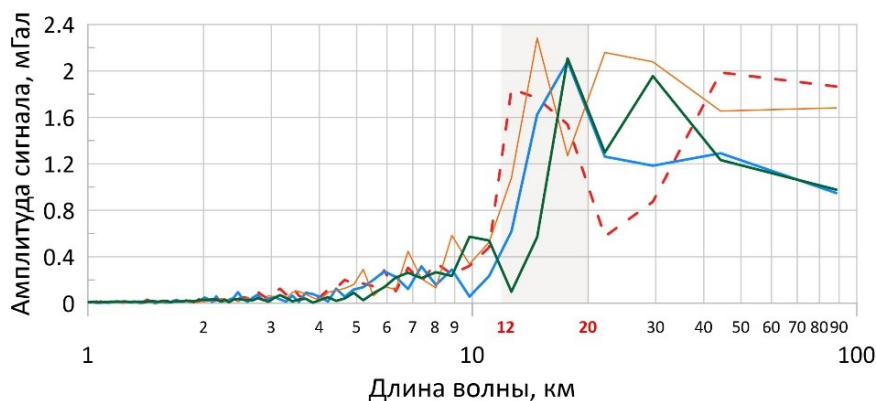


Рис. 3. Графики зависимости разниц «съемка–модель» по тестовым профилям от длин волн аномалий, полученные в рамках спектрального анализа данных; выделен диапазон частот с повышенными отклонениями на всех тестовых линиях

### Литература

1. Andersen O. B. Marine Gravity and Geoid from Satellite Altimetry // Geoid Determination. Theory and Methods. — Berlin: Springer. 2013. P. 401–451.
2. Михайлов П. С., Конешов В. Н., Соловьев В. Н., Железняк Л. К. Новые результаты оценок современных глобальных ультравысокостепенных моделей гравитационного поля Земли в Мировом океане // Гироскопия и навигация. 2022. Т. 30. №4. С. 36–53.
3. Sandwell D. T., Müller R. D., Smith W. H. F., Garcia E., Francis R. New global marine gravity from CryoSat-2 and Jason-1 reveals buried tectonic structure // Science. 2014. V. 346(6205). P. 65–67. DOI: 10.1126/science.1258213.

УДК 550.8.056

## Применение методов машинного обучения к задаче петроупругого моделирования слабоконсолидированных отложений шельфа

Н. Д. Архипов

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

В настоящее время идет активное освоение арктического шельфа, в частности, одной из важных задач является поиск и идентификация опасных геологических процессов и явлений по сейсмическим данным. При этом большое внимание уделяется картированию зон с аномально высоким поровым давлением. В данной работе было проведено моделирование эффективных упругих модулей слабоконсолидированных отложений шельфа, а также был проведен анализ влияния входных распределений параметров моделирования на итоговые распределения эффективных упругих модулей. Заключительным этапом стал анализ применимости методов машинного обучения к восстановлению параметров пористости и порового давления из эффективных упругих модулей.

Согласно исследованиям [1] наиболее эффективным подходом к моделированию петроупругих модулей слабоконсолидированных отложений шельфа с пористостью выше и ниже критической является последовательная комбинация из следующих петроупругих моделей:

- 1) расчет упругих модулей скелета при пористости равной критической на основании контактной модели Герца–Миндлина;
- 2) расчет упругих модулей сухого скелета с учетом влияния цемента на основании модели Хашина–Штрикмана;
- 3) расчет упругих модулей флюидонасыщенной породы на основании модели Гассмана.

При этом эффективные упругие модули итоговой модели зависят от распределения параметров пористости, критической пористости, упругих модулей скелета, упругих модулей цемента, параметров флюида и порового давления. Для моделирования этих параметров использовались равномерные и нормальные распределения, статистики которых были оценены согласно литературным данным [2]. Влияние конкретных параметров на итоговые распределения было оценено при помощи фиксации всех параметров и варьирования одного из них.

Для решения обратной задачи прогнозирования пористости и порового давления из эффективных упругих модулей использовались модели машинного обучения, основанные на деревьях принятия решений [3]. Оценка применимости алгоритма проводилась при помощи метода кросс-валидации на смоделированных данных.

### Литература

1. *Dvorkin J.* [et al.]. Elasticity of marine sediments: Rock physics modeling// *Geophys. Res. Lett.* 1999. V. 26. № 12. P. 1781–1784.
2. *Mavko G., Mukerji T., Dvorkin J.* The rock physics handbook. — Cambridge: CUP, 2020.
3. *Natekin A., Knoll A.* Gradient boosting machines, a tutorial// *Frontiers in neurorobotics.* 2013. V. 7: 21.

УДК 550.8.013

## Исследование свойств случайных неоднородных геологических многокомпонентных материалов с использованием диаграммной техники Фейнмана и уравнения Дайсона

*А. М. Сбойчаков*

Национальный исследовательский университет МЭИ

Диаграммная техника Фейнмана является универсальным аналитическим методом, который позволяет проводить расчеты для физических систем с бесконечным числом степеней свободы, стохастических по природе [1]. Применение квантовых методов и диаграммной техники Фейнмана может оказаться эффективным методом решения ряда сложных задач геофизики, в частности, при изучении пористых и трещиноватых резервуаров методами акустических и сейсмических исследований. Диаграммная техника Фейнмана может быть использована для получения точных уравнений [2, 3]:

- а) конвективной диффузии;
- б) конвективной теплопроводности;
- в) распространения упругих волн;
- г) некогерентного рассеяния волн.

Современное программное обеспечение не учитывает случайную природу неоднородностей в поровом пространстве горных пород должным образом. Часто предполагается, что пористые горные породы имеют периодический характер или случайная неоднородность скрыта только в представительном объеме породы. Усреднение по этому представительному объему снижает исходную задачу до периодической. Тем не менее многочисленные исследования подтверждают, что пористые структуры песчаников и известняков, которые являются нефтегазоносными породами, созданными природой, имеют сложную структуру, выходящую за пределы периодического приближения, и требуют некоторых корректировок. Недавние достижения в лабораторных и полевых исследованиях распространения упругих волн в таких породах позволили построить более точные модели, описывающие пористые структуры за пределами периодического приближения.

Наш подход позволяет значительно расширить существующие модели путем усреднения уравнений движения, описания структуры порового пространства с помощью статистического распределения, которое наиболее точно описывает данную породу. В то же время восстановление статистического распределения изображений пород является задачей, которую можно решить с помощью различных техник (включая машинное обучение), применяемых к уравнению типа Дайсона. Этот подход позволит учитывать распределение порового пространства с необходимой точностью и вывести соответствующие уравнения движения. Это может быть полезно для улучшения точности в наиболее популярных сейчас технологиях цифрового ядра, цифровых месторождений и в обработке данных из сейсмических и акустических исследований нефтегазовых месторождений.

Важным направлением применения является также проблема апскейлинга в геофизике, которая представляет собой последовательный переход от уравнений движения на микроуровне к мезо- и макро-скопическим масштабам. Самые продвинутые подходы способны описывать физику процесса и распределение пор с требуемой точностью на одном масштабе. Однако при переходе на другой масштаб важная информация может быть потеряна. Эта проблема может быть решена с помощью нашего метода, так как этот переход автоматически учитывает более высокие моменты (корреляторы) соответствующего распределения неоднородностей. Правильно записанные уравнения, учитывающие неоднородную структуру среды, могут привести к важным аналитическим оценкам. Мы также рассматриваем численные

методы решения уравнений типа Дайсона [4] в контексте геофизических проблем. Поскольку процедура суммирования диаграмм, приводящая к уравнениям Дайсона [5], повторяется от задачи к задаче, мы рассматриваем самый простой пример слоистой случайной среды для изучения особенностей реализации численных расчетов. Этот пример используется для сравнения прямых расчетов для уравнения с частными производными со случайными коэффициентами (для отдельных реализаций) и расчетов для интегро-дифференциального уравнения (Дайсона) усредненной среды.

### Литература

1. *Mattuck R. D.* A guide to Feynman diagrams in the many-body problem. — New York: McGraw-Hill, 1976.
2. *Кухаренко Ю. А., Сбойчаков А. М., Власов С. Н., Поляк П. Л.* Связь эффективных параметров сейсмических волн со свойствами трещиноватой среды // Материалы Второй Международной сейсмологической школы «Современные методы обработки и интерпретации сейсмологических данных», г. Пермь, 2007 г. — Обнинск: ФИЦ ЕГС РАН, 2007. С. 126–130.
3. *Гончарук В. А., Сбойчаков А. Н., Поляк П. Л., Кухаренко Ю. А.* Уравнения движения нелинейной упругой случайно неоднородной среды // Нелинейная динамика. 2009. Т. 5. № 2. С. 205–213.
4. *Kaye J., Golez D.* Low rank compression in the numerical solution of the nonequilibrium Dyson equation // SciPost Physics. 2021. V. 10(4):091.
5. *Novikov A. V., Posvyanskii D. V.* The use of Feynman diagrammatic approach for well test analysis in stochastic porous media // Comput. Geosci. 2020. V. 24(2). P. 921–931.

УДК 550.344.56

## Геоакустическое поле поверхностной волны типа Рэлея в плоскостроистой среде

*Д. А. Жарков, Р. А. Жостков*

Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН

Рассмотрено распространение поверхностной волны рэлеевского типа вдоль свободной границы слоистого полупространства. В других работах, посвященных этой теме, например [1, 2], основное внимание уделялось дисперсионным свойствам, в то время как амплитудным зависимостям уделено неза- служенно мало внимания, хотя они также несут немало полезной информации о структуре среды.

Поле в упругой среде описывается уравнениями механики сплошной среды, записанными для смещений [3]. Смещение  $\vec{u}$  элемента упругой среды выражается через скалярный  $\varphi$  и векторный  $\vec{\psi}$  потенциалы и в двумерной постановке имеют вид

$$\vec{u} = \nabla\varphi + \text{rot } \vec{\psi}, \quad u_x = \frac{\partial\varphi}{\partial x} - \frac{\partial\psi}{\partial z}, \quad u_z = \frac{\partial\varphi}{\partial z} + \frac{\partial\psi}{\partial x}. \quad (1)$$

Потенциалы удовлетворяют волновым уравнениям, а для монохроматических волн — уравнениям Гельмгольца:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi + k_l^2 \varphi = 0, \quad \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi + k_t^2 \psi = 0. \quad (2)$$

В уравнениях (2) введены волновые числа  $k_l = \omega/c_l$  — для продольных волн и  $k_t = \omega/c_t$  — для поперечных волн. Решения данных уравнений в полупространстве отыскиваются в виде плоских волн, бегущих вдоль оси  $x$  и убывающих по оси  $z$ :

$$\varphi = A e^{-qz} e^{-i(\omega t - kx)}, \quad \psi = B e^{-sz} e^{-i(\omega t - kx)}. \quad (3)$$

Здесь величины  $q = \sqrt{k^2 - k_l^2}$ ,  $s = \sqrt{k^2 - k_t^2}$  определяют характерные масштабы затухания поля с глубиной.

Для слоев решения представляются в следующем виде:

$$\varphi_i = A_{1i} e^{-q_i z} e^{-i(\omega t - kx)} + A_{2i} e^{q_i z} e^{-i(\omega t - kx)}, \quad \psi_i = B_{1i} e^{-s_i z} e^{-i(\omega t - kx)} + B_{2i} e^{s_i z} e^{-i(\omega t - kx)}, \quad (4)$$

где  $q_i = \sqrt{k^2 - k_{li}^2}$ ,  $s_i = \sqrt{k^2 - k_{ti}^2}$ ,  $i$  — номер слоя.



Характеристики поверхностной волны определяются не только уравнениями (1)–(4), но и граничными условиями, позволяющими найти скорость волны и относительные амплитуды. Обозначим через  $n$  количество слоев с учетом полупространства. Поскольку в этом случае существует  $4(n-1)+2$  волновых компонент, то и граничных условий должно быть  $4(n-1)+2$ . На свободной границе должно выполняться условие равенства нулю нормальных и касательных напряжений. На границе  $i$ -го слоя должно выполняться условие равенства нормальных и касательных смещений и напряжений. В случае пяти слоев получаем 18 уравнений. Составляя из них характеристическую матрицу и приравнявая нулю определитель этой матрицы, можно получить дисперсионное уравнение, корнем которого является скорость поверхностной волны. Так как определитель равен нулю, то уравнения линейно зависимы и, следовательно, одно из них можно опустить. Затем переносим последний столбец в правую часть. Так как нас интересуют нетривиальные решения, потребуем равенства нулю определителя оставшейся матрицы. Далее, применяя формулы Крамера, находим относительные амплитуды скалярного и векторного потенциалов по отношению к амплитуде  $B_{21}$  сдвиговой волны в верхнем слое.

Для расчетов использовались следующие параметры:

Номер слоя	Скорость продольных волн, $c_l$ , м/с	Скорость поперечных волн, $c_t$ , м/с	Плотность $\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	Толщина, м
1	2000	1100	1000	50
2	3000	1700	1600	50
3	4000	2300	2200	50
4	5050	3500	3100	50
5	6000	4200	3800	$\infty$

На рис. 1а изображена зависимость модуля амплитуды смещений от частоты (заметим, что кривая имеет довольно характерный вид, который можно использовать для исследования строения среды); рис. 2б демонстрирует, что для данных параметров для некоторых частот амплитуда горизонтальной компоненты смещений существенно больше амплитуды вертикальной компоненты, хотя известно [3], что для классической волны Рэлея на полупространстве вертикальная компонента является доминирующей.

Таким образом, в работе рассчитаны амплитудные характеристики поверхностной волны для пятислойной среды. Показано, что анализ этих зависимостей позволяет получить информацию о структуре среды, а также определять соотношение между горизонтальной и вертикальной компонентой смещений.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22 77 00067.

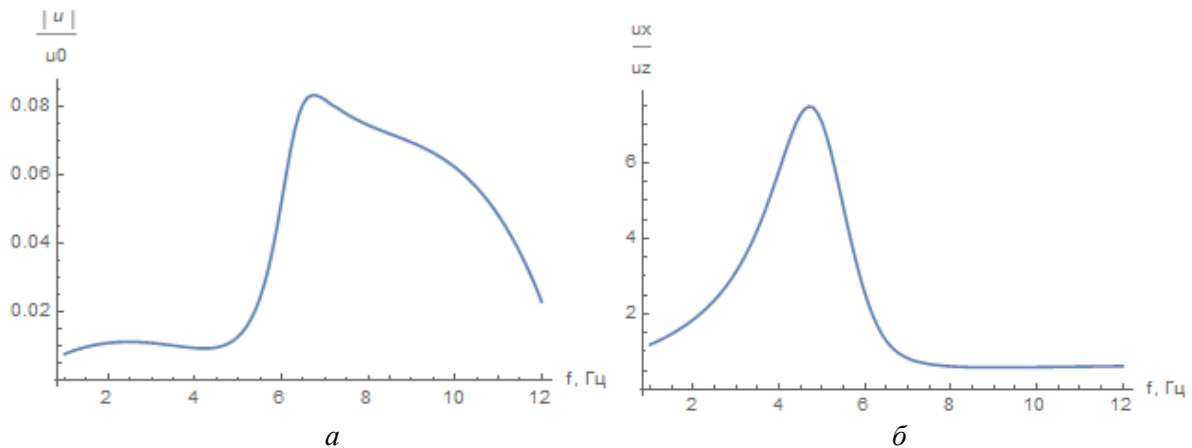


Рис. 1. Зависимость модуля относительной амплитуды (а) и отношения горизонтальной и вертикальной компонент (б) смещений от частоты, где  $u_0$  — нормировочная амплитуда, пропорциональная амплитуде  $B_{21}$  векторного потенциала в верхнем слое

## Литература

1. Жэн Б.-С., Лу Л.-Ю. Волны Рэлея и обнаружение низкоскоростных слоев в слоистом полупространстве // Акуст. журн. 2003. Т. 49. № 5. С. 613.
2. Преснов Д. А., Жостков Р. А., Гусев В. А., Шуруп А. С. Дисперсионные зависимости упругих волн в покрытом льдом мелком море // Акуст. журн. 2014. Т. 60. № 4. С. 426.
3. Викторов И. А. Звуковые поверхностные волны в твердых телах. — М.: Наука, 1981.