

**ТРУДЫ
63-Й ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ МФТИ
23–29 НОЯБРЯ 2020
ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ
И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА**

Министерство науки
и высшего образования
Российской Федерации

Московский
физико-технический институт
(национальный
исследовательский университет)



Москва
Долгопрудный
Жуковский
2020

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

ТРУДЫ

63-й Всероссийской научной конференции МФТИ

23–29 ноября 2020

Фундаментальная и прикладная физика

Москва – Долгопрудный – Жуковский

МФТИ

2020

УДК 53
ББК 22.3
Т78

**Труды 63-й Всероссийской научной конференции МФТИ
23–29 ноября 2020 года. Фундаментальная и прикладная физика. —**
Т78 Москва : МФТИ, 2020. – 522 с.
ISBN 978-5-7417-0754-8

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

УДК 58
ББК 22.3

ISBN 978-5-7417-0754-8

© Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», 2020

Содержание

Программный комитет конференции	17
Организационный комитет конференции.....	18
СЕКЦИЯ «ИТЭР - ШАГ В ЭНЕРГЕТИКУ БУДУЩЕГО»	19
Анализ радиационной защиты электронных компонентов диагностики ВНК	19
Вакуум-плотное биметаллическое соединение (CuCrZr-IG/316L(N)-IG) обращённых к плазме компонентов ИТЭР и особенности его изготовления.....	20
Влияние инъекции азота на экранирование вольфрамовой мишени при воздействии мощного потока водородной плазмы	22
Влияние состава на структуру, термоэлектрические свойства и термостабильность материалов на основе антимонида цинка	24
Измерение дифракционной эффективности голографических дифракционных решеток, используемых в двухканальном спектрометре-полихроматоре высокого разрешения для активной спектроскопии плазмы на установке ИТЭР	25
Исследование свойств газовой завесы как метода защиты стенок термоядерного реактора	26
Моделирование эффекта гало и оценка его влияния на работу активной спектроскопической диагностики для установки ИТЭР.	28
Применение хордовой инъекции в плазму токамака.	30
Расчет функций отклика детекторов Вертикальной Нейтронной Камеры ИТЭР.....	31
Спектральные характеристики парового экранирующего слоя в диапазоне 5 – 70 нм при облучении вольфрама интенсивными потоками плазмы	32
Спектральные характеристики парового экранирующего слоя в диапазоне 350 – 600 нм при облучении вольфрама интенсивными потоками плазмы	34
Цифровой метод разделения сигналов по форме импульса сцинтилляционного детектора LaCl ₃ при регистрации нейтронного и гамма-излучения	36
Экспериментальные исследования ослабления нейтронного потока конструкционными материалами ИТЭР	36
СЕКЦИЯ «ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И КОСМОЛОГИЯ»	38
Анализ фрагментации спектров в столкновениях тяжёлых ядер.....	38
Вклад от аннигиляционных диаграмм в редкий распад $B \rightarrow \pi + \mu + \mu -$ и его влияние на распределение по инвариантной массе лептонной пары	40
Влияние поверхностного нейтронного слоя на спектровую материю в столкновениях релятивистских ядер.	41
Измерение и настройка временных параметров кремниевых детекторов, используемых при определении энергии нейтронов по времени пролета на ускорителе У-120 НИИЯФ МГУ	44
Изучение стерильных нейтрино в реакторных экспериментах	45
Моделирование концентраторов черенковского света для детектора Гипер- Камиоканде с целью увеличения чувствительности к нейтрино низких энергий.....	46
Моделирование сигнала от реликтовой темной материи (WIMP) и фоновых нейтрино для эксперимента NEWSdm.....	48

Моделирование триггера отбора событий с использованием калориметра FNCal установки MPD/NICA	50
Образование состояний чармония $\chi_{cJ} = 0,1,2$ в столкновениях протонов и тяжелых ионов на БАК.....	52
Ограничения на кривизну Вселенной и параметры динамической темной энергии по данным полной формы энергетического спектра галактик и БАО	54
Определение точки столкновения ионов в установке MPD/NICA с помощью переднего адронного калориметра	54
Проектирование системы метаданных физических событий эксперимента BM@N мегапроекта NICA.....	57
Возможные методы прохождения критической энергии в ускорительном комплексе NICA для поляризованного протонного пучка	58
СЕКЦИЯ БИОФИЗИКИ.....	60
Анализ влияния электростатических зарядов цитохрома c на эффективность реакций с его участием.....	60
Анализ микрофлоры Азовского моря, способной к синтезу аутоиндуктора кворум- чувствительной системы LuxR/LuxI типа.....	61
Влияние параметров аминокислотной последовательности на стехиометрию с-ринг АТФ-синтазы.	62
Гибридизационные свойства фосфорилгуанидиновых олигонуклеотидов при низкой концентрации олигомеров в растворе	63
Двухэтапная активация lux-оперона бактерий <i>Aliivibrio fischeri</i>	65
Измерение кинетики бактериородопсина в присутствии гуанидин-гидрохлорида методом лазерной время-разрешенной спектроскопии	66
Изучение модифицированных вариантов термостабильного флуоресцентного белка CagFbFp ..	67
Изучение условий и механизмов димеризации АТФ-синтазы из хлоропластов <i>Spinacia Oleracea</i>	67
Исследование структурных изменений в липидных бислоях в присутствии двухвалентных катионов металлов	69
Исследование структуры комплекса цитохрома P450.....	71
Structural study of oncogenic mutation of a G-protein coupled receptor	71
Исследование флуоресцентных белков методом двухфотонной поляризационной микроскопии	72
Исследования вариантов термостабильного флавин-связывающего флуоресцентного белка на основе LOV-домена из термофильной бактерии <i>Chloroflexus aggregans</i>	73
Клонирование luxA, luxE и luxC генов lux-оперона <i>Photobacterium luminescens</i>	74
Конструирование биосенсоров на основе грамположительных бактерий <i>Bacillus subtilis</i> 168.....	75
Конструирование цельноклеточного биосенсора на основе промотора <i>iscRSUA</i> оперона.....	76
Масс-спектрометрический анализ связывания лигандов с рецепторами, сопряженными с G-белком.....	77
Методические особенности использования малоуглового рассеяния для структурных исследований мембранных белков на примере комплекса NpSRII/NpHtrII.....	78
Моделирование и предсказание структуры белков lux-оперона	79

Надёжный метод вычитания фона для данных рентгеновской дифракции	80
Неинвазивный мониторинг динамики гибели клеток, индуцированной 5-аминолевулиновой кислотой, методом голографической томографии.....	81
Определение степени олигомеризации канального родопсина 2 методом флуоресцентной фотоактивируемой локализационной микроскопии	82
Оптогенетический контроль мембранного потенциала митохондрий клеток НЕК293Т, экспрессирующих родопсин	82
Подбор красителей для одномолекулярной спектроскопии реверверина.....	84
Получение и характеристика цистеин-содержащих нанодисков	84
Почему ДНК конденсируется в присутствии ионов натрия легче, чем в присутствии ионов калия	86
Измерение константы связывания мембранных белков с лигандами при помощи MST.....	88
Различия в физико-химических свойствах LOV-домена, связанного с рибофлавином и флавиномононуклеотидом (FMN)	88
Разработка протоколов и структурные исследования рекомбинантных апоферритинов из различных организмов.....	89
Создание штамма-продуцента белков семейства глутаматных транспортеров SLC1A в экспрессионной системе LEXSY	90
Способность поездов системы интрафлагеллярного транспорта конвертироваться из антероградной формы в ретроградную вне цилиарного кончика	91
Сравнение эффективности родопсинов-протонных помп для оптогенетического контроля мембранного потенциала клетки	92
Структурно-функциональные исследования мутантных форм фотореакционного центра <i>Rhodobacter sphaeroides</i>	93
Структурно-функциональные особенности белка Е оболочки коронавируса SARS-CoV-2	94
Структурные изменения белков, связанные с радиационным повреждением	95
Структурные исследования самособирающихся рекомбинантных химерных белковых комплексов на основе апоферритина	96
Structural studies of self-assembling recombinant chimeric protein complexes based on apoferritin....	97
Филогенетический анализ семейства фотодекарбоксилаз жирных кислот.....	97
Характеризация биологической и оптической совместимости микроэлектродных матриц с пассивирующим слоем Al ₂ O ₃ для электрофизиологических измерений нейронных культур	98
Черноморские изоляты светящихся морских бактерий принадлежат к новому виду <i>Vibrio aquamarinus</i> sp. nov.	100
СЕКЦИЯ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ИНФОРМАЦИИ	102
Вероятностное представление цифровых квантовых вычислений	102
Информационные свойства приближённого измерения координаты.....	104
Использование псевдостochastic представления для симуляции квантовых процессов ..	106
Исследование квантовой системы, находящейся под воздействием случайного телеграфного шума, на основе методов машинного обучения.....	108
Исследование модели Швингера с помощью нейронных сетей.....	110
Квантовое преимущество с использованием гибридного алгоритма для решения систем линейных уравнений.	111

Квантово-оптическая томография в непрерывных переменных с помощью машинного обучения	113
Классификация запутанных состояний с помощью метода обучения с путаницей	114
Неразрушающие квантовые измерения кубитов.....	116
Разработка схемы аппаратного ускорителя квантовых вычислений	117
Реализация квантовых алгоритмов на кудитах	119
Трехкубитный запутывающий вентиль в системе трех двойных квантовых точек	121
Формализм Операторов Квантайзер-Деквантайзер для Построение Новых Интегральных Преобразований Между Квази-вероятностными Функциями и Томограммой.....	122
Энтропия чистых состояний уровней энергии гармонического осциллятора в вероятностном представлении квантовой механики.....	124
СЕКЦИЯ КОСМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ И СОВРЕМЕННОЙ АСТРОФИЗИКИ.....	126
Активность гравитационных волн в атмосфере Марса на высотах 20 - 160 км по данным солнечного просвечивания аппарата ACS/TGO.....	126
Анализ спектров пропускания водяного пара для атмосферы Марса в эксперименте по солнечному просвечиванию ACS-TIRVIM/ExoMars-TGO	127
Взаимодействие релятивистских электронов с сигналами наземных ОНЧ передатчиков	128
Волновые процессы во вращающейся плазме в приближении Буссинеска	130
Исследование гамма-вспышек Земного происхождения, зарегистрированных экспериментом GBM/Fermi.....	130
Исследование квазара с пиковой формой радиоспектра на масштабах парсек	132
Исследование физических характеристик и морфологии джета молодого звёздного объекта Th 28	133
Исследование фона в гамма-диапазоне по данным SPI-ACS/INTEGRAL на основе большой выборки гамма-всплесков	134
К вопросу о нуклеосинтезе нейтронных звёзд	136
Комплекс приборов для анализа космической плазмы	137
Математическое моделирование формирования треков частиц солнечного ветра в многопроволочных 3D газовых детекторах для наноспутников.....	137
Моделирование сцинтилляционных установок Tunka-Grande и TAIGA-Muon через инструментарий Geant4	139
Неразрешенные двойные звезды в рассеянных звездных скоплениях	140
О возможном объяснении трёхгорбых средних профилей радиопульсаров.....	142
Оценка внутренних параметров струйного выброса в галактике M87 с использованием карт спектрального индекса	143
Плазменно-пылевые процессы в атмосфере Марса.....	144
Трехволновые взаимодействия волн в сжимаемых вращающихся течениях мелкой воды.....	147
СЕКЦИЯ ЛАЗЕРНЫХ СИСТЕМ И СТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ	149
Влияние давления на абсорбционные и транспортные характеристики синтетического меланина	149
Влияние допирования металлами на протонную проводимость меланина.....	150
Генерация наночастиц золота методом лазерной абляции в расплавах солей.....	151

Измерительная система на базе стабилизации средней частоты перестраиваемого лазера	152
Ионизация летучих органических соединений излучением лазерной плазмы	153
Нарушение кубической симметрии в редкоземельных додекаборидах с динамическими зарядовыми страйпами	153
Численное моделирование фемтосекундного KLM-лазера с диодной накачкой	155
СЕКЦИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ И ЯДЕРНЫХ ПРОЦЕССОВ	157
Анализ влияния примесных газов на выходные характеристики термоэмиссионных реакторов-преобразователей	157
Аналитическая модель предельно сильной ударной волны с неізотропными кинетическими температурами.....	160
Асимптотическая модель ударно-сжатой трехкомпонентной смеси газов	160
БОНУС – модель нуклидной кинетики в составе интегрального ПрЭВМ СОКРАТ/ВЗ: модернизация, верификация	161
Влияние преципитатов на теплопроводность нитридного топлива	163
Влияние степени структурного разупорядочения на радиационную стойкость монокристаллов флюоритов.....	164
Генерация библиотек нейтронных ядерных данных для осуществления транспортных расчетов методами Монте-Карло	165
Генерация проблемно-ориентированных систем ядерных данных для моделирования глубокого переноса излучений в сложных средах и композициях	167
Исследование максимумов разделения смеси газов в зависимости от их концентраций.....	169
Исследование неравновесного течения в много-трубчатом микронасосе Кнудсена путем численного решения кинетического уравнения Больцмана проекционным методом	170
Исследование Производство ⁹⁹ Mo с помощью фотонейтронной реакции методом расчета Монте-Карло	172
Исследования зависимости спектрально-люминесцентных свойств TR3+- ионов от микроструктуры кристаллических твердых растворов и степени их разупорядочения	174
Компьютерные модели течения газа через коллиматор на основе кинетической теории.	175
Моделирование двумерного истечения двухкомпонентной газовой смеси в вакуум через тонкую щель в широком диапазоне значений числа Кнудсена.	176
Моделирование переноса в гетерогенной композиции материалов мгновенных нейтронов и гамма-излучения из активной зоны ядерного реактора	179
Моделирование поведения монооксида углерода в ВЦС ЭГК методом решения численного уравнения Больцмана	181
Оценка изменения изотопного состава конструкционных материалов ТВС и их активности....	182
Поверхность потенциальной энергии для окисления циклопента[б]нафтадена C ₁₃ H ₉	183
Регулирование мощности энергоблока с ВВЭР-1200 в маневренных режимах	184
Решение задач нестационарных процессов энергетического реактора непутона (флуктуации амплитуды импульса, возможность колебательной неустойчивости) с использованием кода SERPENT	186
Численные исследования анизотропии трещиноватых сред.	192
СЕКЦИЯ НАНООПТИКИ И СПЕКТРОСКОПИИ	194

Влияние электрон-фононного взаимодействия на температурный сдвиг бесфононной линии SnV центров в алмазе	194
Гибридные ассоциаты коллоидных квантовых точек сульфида серебра с метиленовым голубым для антимикробных покрытий	195
Исследование ИК-люминесценции центров окраски SiC-4H и SiC-6H методами спектроскопии высокого разрешения	197
Квантовая электронная плазма и поглощение Е-волны в металлической пленке	199
Композитные наноструктуры Au@SiNWs для молекулярной сенсорики с использованием спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния света	201
Компьютерное микрофотометрирование фотографических спектров люминесценции	202
Методы спектроскопии комбинационного рассеяния света и оптической микроскопии для мониторинга процесса растворения наночастиц пористого кремния в модельных жидкостях и живых клетках	204
Микроструктура лазерной керамики Yb:LuAG - возможности метода комбинационного рассеяния света.....	206
Многоканальный гетеродинный спектрометр для контроля уровня содержания парниковых газов в атмосфере Земли.....	207
Моделирование дисперсного нелинейного показателя преломления методом FDTD.....	207
Моделирование субволнового спектрального переключателя методом дискретных диполей ..	209
Наблюдение узких спектральных линий в фононном крыле GeV--центров в НРНТ микроалмазах.....	211
Неинвазивные методы диагностики новообразований кожи.....	212
Низкочастотная нелинейная диэлектрическая спектроскопия нематического жидкого кристалла в планарной и неориентированной ячейке.....	213
Определение энергии химического сдвига в металлах и их оксидах методом функционала плотности	215
Оптимизация усиления ближнего поля при резонансном рассеянии света наночастицами	216
Оптическая диагностика одиночных диэлектрических наночастиц на поверхности стеклянных и кварцевых пластинок.....	217
Оптические свойства низкоразмерных перовскитоподобных галогенидов свинца с катионами пиридиния и его производными	217
Применение оптимизационных алгоритмов распознавания аберраций волнового фронта по картине ФРТ.....	219
Разработка многоканального частотно-модулируемого лидара ближнего ИК диапазона	221
Совершенствование неинвазивных методов ранней диагностики меланомы кожи.....	222
Спектральные свойства атомов, локализованных в импульсной оптической дипольной ловушке.....	223
Спектральная оценка состояния тканей зубов при пародонтозе.....	224
Спектр комбинационного рассеяния света тонких пленок оксида цинка, нанесенных при разных температурах	226
Спектроскопия квантовых биений в системе 3 одинаковых, близко расположенных атомов....	227
СЕКЦИЯ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ.....	229
Акустика и звуковое восприятие множественного соударения	229

Влияние длины волны лазерного излучения на наведенное поглощение лазерного излучения органическими соединениями фталоцианинового ряда в твердотельной матрице композит нанопористое стекло полимер при наносекундной длительности лазерного импульса	231
Гамма мониторинг поглощенной дозы импульсного пучка протонов при флэш терапии	231
Интерференционные явления в осмотических системах на мембранах с субнаноразмерными порами.	233
Интерферометрия в работе по изучению динамики искрового разряда в воздухе в промежутке острие – плоскость.....	235
Исследование параметрического рентгеновского излучения в порошковых мишенях	237
Капиллярный волновод рентгеновского излучения	238
Метод калибровки массы в новом определении СИ при комнатной температуре	239
Метод навигации, основанный на анализе степени поляризации небесного свода	241
Методы определения коэффициента теплоотдачи в системе твердое тело - газ	243
Определение практического коэффициента Вант-Гоффа разбавленных растворов в осмотической системе с субнаноразмерными порами.	244
Определение условий для исследования продольного сдвига перетяжки пучка Гаусса	246
Оптимизация стратегии эксперимента.....	247
Оценка количества убегающих электронов в атмосфере Земли	249
Оценка эффективности потока ионов как рабочего тела для авиационного двигателя.....	250
Применение метода ИК-спектроскопии для исследования влияния воды на свойства водосодержащих систем на основе чистого полиэтилена и полиэтилена с различными наполнителями.....	251
Простейшая реакторная модель динамики лавин убегающих электронов в грозовых облаках	253
Расчет и экспериментальная модель магнитогидродинамического двигателя	255
Спектр нормальных частот линейных ионных кристаллов в комбинированных радиочастотно-оптических ловушках	256
Сравнение методов обработки данных диффузионного эксперимента DOSY для систем блок-сополимер - гомополимер.....	258
Экспериментальные исследования физики квазидвумерной турбулентности	259
СЕКЦИЯ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ	262
Кинетическая модель эволюции жидких включений в соляных породах при высоких градиентах температуры	262
Корреляционные измерения расхода в каналах масштабных моделей элементов ЯЭУ с применением матричных кондуктометрических систем.....	264
Определение гидродинамических характеристик в зоне смешения стратифицированных потоков с применением матричных кондуктометрических систем	265
Особенности построения расчетной модели защитных оболочек при воздействии нагрузок внутри сечения стенки цилиндра.....	266
Оценка доверительного интервала при определении положения максимума взаимно-корреляционной функции применительно к корреляционному методу измерения скорости потока теплоносителя при исследовании гидродинамики турбулентных потоков	267
Перенос примеси в двухпористых средах в присутствии удаленного адвективного канала	268

Проблемные аспекты теплотехнической надёжности ядерной энергетической установки с газовой системой компенсации объема	270
Разработка конструкции исследовательского реактора на основе ТВС реактора ВВЭР-440.....	271
Расчет замедлителя нейтронного конвертора («Тепловой колонны»).....	273
Сравнение аналитических и нейросетевой моделей разрушения гранита	274
Экспериментальные исследования для валидации расчетных моделей процессов неравновесного газовыделения применительно к элементам ЯЭУ с газовой системой компенсации давления..	277
Экспериментальные подходы к оценке разрешающей способности сетчатых кондуктометрических датчиков.....	278
СЕКЦИЯ ПРОБЛЕМ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ, ЭЛЕКТРОФИЗИКИ, КВАНТОВОЙ РАДИОФИЗИКИ И ПРОБЛЕМ ФИЗИКИ И АСТРОФИЗИКИ	279
Влияние температуры и длительности импульса накачки на параметры генерации в комбинационно-активных порошковых средах.	279
Генерация легкой темной материи за счет процесса Дрелла-Яна и ее взаимодействие с эмульсионным детектором в эксперименте SHiP (Search for Hidden Particles).....	281
Исследование структурных свойств радиационно-стойких многослойных структур $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2$ и $\text{ZrO}_2/\text{SiO}_2$ методом рентгеновской рефлектометрии.....	282
Модовый состав излучения пикосекундного Nd:YAG лазера с абберационной термолинзой при продольной диодной накачке.....	283
Оптическая ловушка для получения рекордно большого квантово-вырожденного атомного газа.....	284
Прототип детектора большого объема в Баксанской нейтринной обсерватории ИЯИ РАН	286
Расчет констант скоростей диссоциативного возбуждения молекулярных ионов инертных газов электронным ударом	287
Сравнительный анализ эффективностей резонансных механизмов диссоциативного возбуждения и диссоциативной рекомбинации молекулярных ионов инертных газов.....	289
Трехмерные полимерные оптические мосты: изучение морфологии.....	290
СЕКЦИЯ СОВРЕМЕННЫХ ПРОБЛЕМ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ.....	292
Генерация фотонов микроволнового диапазона в системах сверхпроводящих кубитов.....	292
Исследование различия фаз аномальных функций Грина и фазы параметра порядка в диффузных джозефсоновских контактах.....	294
Исследование сверхпроводящих гибридных структур на основе магнитных топологических изоляторов.....	295
Масштабируемые элементы джозефсоновской магнитной памяти на основе прямоугольных джозефсоновских контактов с ферромагнитным барьером.	296
Микроволновая спектроскопия динамики вихрей Абрикосова	298
Одноатомный лазер на основе трансмона.....	299
Tunable microwave transmission line	301
Протокол калибровки двухкубитного CZ гейта.....	303
Структура вихря в чистом сверхпроводнике вблизи плоского дефекта.....	305
Характеристики операций со сверхпроводниковыми кубитами	307

Шум краевого тока в двумерном топологическом изоляторе, связанный с рассеянием назад на магнитной примеси	308
Экспериментальное исследование массива трансмонов	309
СЕКЦИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ.....	312
ЛНС как фотон-фотонный коллайдер: ограничения на $GH \rightarrow \gamma\gamma$	312
Аналитическое исследование спектрального форм-фактора в модели SYK	312
Бигармоническое пространство для $N=4$ суперсимметричной теории Янга-Миллса	314
Влияние приливных сил на измерения аномального магнитного момента мюона	315
Дополнительные расходимости пропагаторов на пространствах с горизонтами	316
Исследование нарушений зависящих от времени неравенств Вигнера в системе нейтральных псевдоскалярных мезонов с фоном.....	317
Исследование различных граничных условий в решеточной глюодинамике.....	318
Ток фермионов на фоне постоянного внешнего электрического поля	320
Кинетика фотолюминесценции для квантовой ямы InGaAs/GaAs с дельта-слоем Mn.....	321
Нестандартные двоичные представления координаты и импульса в квантовой механике	323
Об эквивалентности двух конструкций Зеркальной симметрии	325
Поведение дикварков в плотной и горячей ядерной материи	326
Применение средств компьютерной алгебры к вычислению амплитуды $\pi\pi$ -рассеяния	326
Связь динамики Земли со вспышками эпидемии Ковид-19.....	328
Стабильность хиггсовского потенциала в моделях с тремя дублетами Хиггса.....	329
Ток фермионов на фоне внешнего пульса	331
Три-векторные деформации решений 11-ти мерной супергравитации.....	332
Функциональные уравнения Гамильтона – Якоби, Шрёдингера и Вильсона – Полчински.....	334
СЕКЦИЯ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ПЛОТНОСТЕЙ ЭНЕРГИИ	337
Автомодельность нелинейного экранирования в резко-асимметричной комплексной плазме ..	337
Влияние молекулярной массы полимера на кинетику образования кластеров в потоке	337
Вращение плазмы в отражательном разряде с термокатодом	338
Выбор смесей, моделирующих ОЯТ оксидного типа, для экспериментов по плазменной сепарации и теоретических расчётов	340
Гидродинамическое описание расширения квантово-электродинамического каскада в поле интенсивного лазерного импульса	341
Движение активной броуновской частицы в сверхтекучем гелии	343
Динамика и формирование структур микронных и субмикронных частиц в результате ионного распыления мишени в плазме тлеющего разряда постоянного тока	343
Динамика характеристик электронных и позитронных пучков в лазерно-плазменном ускорителе.....	344
Исследование процессов энергетического обмена в двухслойных системах неидентичных заряженных частиц.....	345
Исследование спектральных характеристик стохастического движения макрочастиц в плазменно-пылевых цепочечных структурах.....	345

Исследование энергетического распределения ионов плазмы отражательного разряда с дополнительной термоэмиссией многосеточным анализатором.....	346
Кумуляция плотности энергии сильноточного электронного пучка в вакуумном диоде со взрывоэмиссионным катодом	348
Лазерно-индуцированное активное броуновское движение, содержащее феррофлюид капель эмульсии.....	350
Масс-спектроскопическая диагностика оксид-содержащей плазмы диффузной вакуумной дуги.....	350
Параметры ультрарелятивистских электронов, генерируемых при взаимодействии субпетаваттного лазерного импульса с плазмой околоритической плотности.....	352
Первопринципное исследование высокотемпературных свойств циркония в твердом и жидком состояниях	353
Плазменно-пылевые структуры в тлеющем разряде при криогенных температурах	354
Пыле-акустические волны в слабосвязанной криогенной пылевой плазмы	355
Расчет термодинамических свойств двухатомных молекул с низкой энергией диссоциации в газовой фазе	356
Структуры и динамика янус-частиц в коллоидной плазме при внешнем воздействии	357
Теплофизика микрочастиц в жидком гелии	358
Ускорение электронов в поле плазменной кильватерной волны, генерируемой фемтосекундным лазерным импульсом высокой интенсивности.	358
Характер влияния мощности лазерного излучения на броуновское движение в коллоидных системах	360
Экспериментальное исследование излучательных свойств тугоплавких материалов методом рефлектометрии.....	360
СЕКЦИЯ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА	362
Анализ микроструктуры и процессов перемагничивания спеченных композиций на основе порошков сплавов $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$, $\text{Sm}(\text{Co}_{0,6}\text{Cu}_{0,4})_6$ и $\text{Sm}(\text{Co}_{0,5}\text{Cu}_{0,5})_5$	362
Анализ термодинамического равновесия кубического и тетрагонального бейнита в сплавах железо-углерод в случае запрета на образование карбидов.....	364
Взаимодействие тока инжектированных зарядов с движением жидкости.....	365
Влияние включений ZnO и легирования In на термоэлектрические свойства скуттерудита $\text{Co}_4\text{Sb}_{12}$	366
Влияние подложки на проявление классического и квантового эффектов в ультратонких пленках висмута	368
Выращивание двухъямных $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x < 0.1$) гетероструктур для исследования низкоразмерных электронно-дырочных систем.....	370
Двумерный полупроводник MoS_2 : анализ структуры аморфной фазы методом спектроскопии рентгеновского поглощения.....	372
Динамика процесса перемагничивания аморфного магнитного микропровода.....	373
Исследование влияния дырочного допирования в соединении EuSn_2As_2	374
Исследование образования пор при растяжении тугоплавких металлов	376
Исследование оптических свойств тонких пленок (Al_2O_3 , ZnO, AZO) / хитозан, изготовленных методом атомно-слоевого осаждения.	377

Исследование разворота слоя GaAs в гетероструктурах GaAs/Ge/GaAs для темплейтов оптических нелинейных преобразователей с регулярной доменной структурой.....	378
Исследование структуры аморфной фазы двумерного MoS ₂ методом первопринципных расчетов	379
Исследование транспортных свойств планарных структур из топологического изолятора V-Bi _{1.08} Sb _{0.9} Sn _{0.02} Te ₂ S.....	381
Моделирование высокоскоростного соударения металлических пластин с использованием искусственной нейронной сети в качестве уравнения состояния	385
Моделирование радиационного воздействия на частицы микросфер Al ₂ O ₃ в программном комплексе GEANT4	386
Модификация поверхности алюминиевого сплава АК12ММгН методом микродугового оксидирования.	388
Особенности фазового перехода в тонких пленках FeRh	390
Оценка подвижности ДЭГ при реализации спин – поляризованного транспорта в гетероструктуре AlSb/InAs/AlSb	391
Плазменные возбуждения в частично экранированных двумерных электронных системах	394
Прогнозирование образования конкурирующих фаз при росте тонких плёнок (Mn _{1-x} Cr _x) ₂ GaC на MgO(111) с использованием модели эффективной теплоты образования и метода решёток совпадающих узлов.....	395
Просвечивающая электронная микроскопия продукта, полученного электродуговым методом в системе с молибденом, углеродом и азотом	398
Расчет смещения на атом при облучении материала на основе NdAlO ₃ со структурой перовскита.....	399
Резонансная фотолуминесценция двумерной электронной системы в условиях формирования объемного состояния дробного квантового эффекта холла 1/3.....	400
Синтез, уточнение кристаллической структуры и мёсбауэровские исследования монокристаллов Fe _{1-x} Ga _x VO ₃	402
Скорость деформации во фронте ударной волны в полимеризованной эпоксидной смоле.....	404
Спиновые магнитоэкситоны в квантово-холловском ферромагнетике при факторе заполнения	406
Структура и свойства монокристаллов комплексов на основе фталоцианиноподобных молекул с азотсодержащими лигандами.....	407
Структурные и оптические свойства иодида холина под давлением	409
Тепловое расширение монокристаллических пленок со структурой феррит-гранатов	411
Теплофизические свойства твердых растворов Mg ₂ Si-Mg ₂ Sn с включением наноразмерных частиц TiO ₂	412
Фотолуминесценция YSZ керамик активированных европием	414
Фрактальная размерность доменной структуры редкоземельного интерметаллида Sm(Co,Cu,Fe) ₅ в высококоэрцитивном состоянии	416
СЕКЦИЯ ФОТОНИКИ И ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ	418
Influence of crystal field distortions on the energetic fine structure of divalent iron in single crystalline lead substituted M-type barium hexaferrite.....	418
Влияние электрического поля на адсорбционные свойства поверхности.....	420

Возбуждение локализованных плазмонов в графене с помощью аperiодических самоорганизованных массивов металлических антенн	420
Возбуждение поверхностных плазменных волн постоянным электрическим током	422
Генерация спиновых токов в структуре фотонный кристалл/BIG/Pt с помощью лазерного нагрева.....	423
Гигантская анизотропия в природных ван-дер-ваальсовых материалах для фотоники следующего поколения	424
ГКР-активные наноструктуры для высокочувствительного анализа живых клеток.....	425
Диффузионная динамика и образование кластеров в системах активной материи на основе ансамблей вращающихся роботов	427
Затухание плазмонов в электронно-открытых системах.....	429
Динамика доменной стенки в ферромагнетиках под воздействием спинового тока вблизи точки компенсации момента импульса	431
Излучение и распространение электромагнитных волн в двухосных кристаллах	432
Изучение переключаемых оптических и структурных свойств пленок VO ₂	434
ИК-детектор на основе гетероструктуры кремний/квантовые точки Ag ₂ S.....	435
Инфракрасная спектроскопия тонких плёнок искусственного зумеланина.....	437
Исследование зависимости параметров запрещенной зоны тонких пленок оксида цинка от технологии их нанесения.....	438
Исследование температурных зависимостей параметра затухания Гильберта в гетероструктурах ферромагнетик/топологический изолятор.....	439
Метод измерения поверхностного сопротивления ультратонких пленок золота	441
Метод синтеза субволновых дифракционных элементов с адиабатически меняющейся глубиной	442
Микромагнитное моделирование электроиндуцированного ферромагнитного резонанса в магнитном туннельном переходе	444
Моделирование плазмонных наноджетов	445
Наноструктурированный графен как перспективный материал для создания биологических сенсоров.....	446
Об оптимальном выборе контактной пары металлов в фотодетекторах на основе графена.....	447
Оптимизация несмещенного спинового диода с перпендикулярной анизотропией	449
Оптические свойства графена, синтезированного химическим осаждением из газовой фазы ..	450
Оптические свойства резонансного одномерного фотонного кристалла со 100 квантовыми ямами InGaN.....	451
Оптический микрорезонатор Фабри-Перо, полученный методом двухфотонной литографии ..	453
Оптомеханические модуляторы и сенсоры движения на основе массива нанонитей.....	454
Перестраиваемые метаповерхности с использованием нелинейных двумерных полупроводников	455
Перестраиваемые состояния в континууме для управления фотонными системами.....	457
Перспективы применения волоконно-оптических систем мониторинга.....	458
Плазмонное усиление фототока в двумерных системах за пределами эффектов сильных полей.....	460

Плазмонные метаповерхности для усиления оптического отклика от двумерных материалов	461
Плотность оптических состояний в нанорезонаторе с усилением	461
Поверхностные плазмон-поляритоны в ультратонких металлических пленках	462
Поверхностный плазмонный резонанс в CVD графене для увеличения фотопоглощения в ИК диапазоне	463
Прозрачная электроника на основе ультратонких металлических пленок	465
Разработка электрохимического подхода к синтезу оксида графена	466
Сверхбыстрый детектор дальнего ИК диапазона на основе графена	467
Свойства переключаемых модуляторов суб-ТГц/ТГц излучения на основе метаповерхностей из VO_2 и Au	469
Спин-фононное взаимодействие и магноны в монокристалле LiNiPO_4	470
Температурная зависимость оптоэлектронных свойств нанолент трисульфида титана	472
Тепловизионный контроль температуры источников питания светодиодных фито-модулей	473
Терагерцовая мягкая мода в замещенном гексаферрите бария $\text{Ba}_{1-x}\text{Pb}_x\text{Fe}_{12}\text{O}_{19}$	474
Терагерцовая спектроскопия энергетических состояний одиночных молекул воды, локализованных внутри фуллеренов C_{60}	476
Управление спектром когерентного излучения среднего ИК диапазона при изменении внешней фокусировки	478
Устойчивые к воздействию воздушной среды тонкие медные пленки для плазмонных приложений, созданные методом УФ-озонирования	479
Экспериментальная демонстрация эффекта “плазмонного крюка” в диэлектрической асимметричной частице	481
Эпитаксиальные гетероструктуры $\text{InGaAs}/\text{InGaAsP}/\text{InP}$ для мощных фотоприемников ближнего ИК-диапазона	482
СЕКЦИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ОСНОВ МНОГОМАСШТАБНОГО АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ	485
Влияние кильватерного потенциала на динамику пылевых частиц в комплексной плазме	485
Воспроизведение поликристаллической структуры железа с помощью метода молекулярной динамики	487
Дефекты кубической фазы магнетита: результаты расчета в DFT+U	487
Изучение роли поляризации в процессе ионной проводимости керамики диоксида циркония	488
Исследование борида вольфрама при помощи T-USPEX	489
Коллективные движения атомов в твёрдых телах	491
Консервативный остаток пролина в трансмембранных доменах рецепторов семейства IR: структурная и функциональная роль	494
Механизм связывания антибиотиками галлидермин и эпидермин пирофосфатной группы липида II	494
Моделирование низкоэнергетической динамики решетки высших боридов и интерметаллидов с разной иерархией масс	496
Молекулярно-динамическая модель кристалла лизоцима	498
Молекулярно-динамический расчет свойств н-додекана	498
Молекулярно-динамическое моделирование точечных дефектов вюстита	500

Образование каскадов смещений в хромите	500
Подбор параметров расчета фононного спектра твердого молекулярного водорода	502
Полиморфные превращения и плавление льда XVII: молекулярно-динамическое моделирование	502
Применение нейронных сетей для описания физических зависимостей металлов на основе данных молекулярно динамического моделирования	503
Применимость стандартных приближений в расчетах динамических свойств твердого водорода.	505
Расчет упругих свойств аморфного льда	506
Транспортные процессы в водных растворах сахарозы	506
СЕКЦИЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ И НАНОФОТОНИКИ.....	509
Анализ пространственного распределения плотности мощности поля второй гармоника, генерируемого от линейной структуры из диэлектрических цилиндрических частиц большой высоты	509
Влияние природы парамагнитного металла-комплексобразователя на спектральные свойства фталоцианинов сэндвичевого строения.....	511
Дисперсионные свойства трехмерного проволочного метаматериала, состоящего из двух независимых металлических сеток.....	512
Модель для описания аномально высокого коэффициента усиления в нанопластинках коллоидных квантовых точек	514
Ошибки, возникающие из-за краевых эффектов при измерении характеристик рассеяния в бистатических измерениях	515
Разработка управляемой частотно-селективной поверхности для СВЧ диапазона на основе тонких плёнок VO ₂	517
Синтез и магнитные свойства порошка железа, полученного с помощью метода спрей-пиролиза	518
Создание дефазирующими резервуарами долгоживущего запутанного состояния в системе двух кубитов.....	519
Спонтанная деформация и намагниченность в легированном топологическом изоляторе.....	520
Электроосаждение супермаллоя NiFeMo на подслое меди.....	522

Программный комитет конференции

Н.Н. Кудрявцев, ректор МФТИ – председатель

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

А.А. Воронов, проректор по учебной работе, и.о. директора ЛФИ

Е.А. Белянко, директор ФРКТ

С.С. Негодяев, директор ФАКТ

В.В. Иванов, директор ФЭФМ

А.М. Райгородский, директор ФПМИ

Д.В. Кузьмин, директор ФБМФ

П.А. Форш, директор ИНБИКСТ

Организационный комитет конференции

Д.А. Диких, руководитель направления «Образование» ЦУП – председатель

С.О. Русскин, представитель ФРКТ

Е.Ю. Чиркина, представитель ЛФИ

Ю.А. Борисов, представитель ФАКТ

А.В. Шадрин, представитель ФЭФМ

Е.Г. Молчанов, представитель ФПМИ

Е.Е. Куликов, представитель ФБМФ

Е.И. Нехаева, представитель ИНБИКСТ

М.В. Костелева, представитель УНЦ ГСН

М.В. Кучеренко, представитель инновационно-технологического центра

Е.П. Яковлева, начальник отдела содействия трудоустройства выпускников

Е.Д. Жебрак, начальник отдела координации поисковых исследований

Секция «ИТЭР - шаг в энергетику будущего»

Председатель: Е.П. Велихов (д.ф.-м.н., акад. РАН)

Зам. председателя: А.В. Красильников (д.ф.-м.н.), В.М. Сафронов (д.ф.-м.н.)

Секретарь: И.М. Позняк

Дата: 26.11.2020 Время: 10:00

УДК 533.9.07

Анализ радиационной защиты электронных компонентов диагностики ВНК

Е.Д. Кофанова^{1,2}, Д.А. Кумпилов^{1,2}, Р.Н. Родионов², Г.Е. Немцев²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

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

Вертикальная Нейтронная Камера - диагностическая система ИТЭР, предназначенная для измерения профиля нейтронного источника плазмы [1]. ВНК состоит из 11 каналов нейтронных коллиматоров, расположенных в верхнем 18 и нижнем 14 портах вакуумной камеры токамака. В каждом канале стоит блок детектирования, состоящий из двух ионизационных камер деления с радиатором из ^{238}U и двух алмазных детекторов.

Сигнал с детекторов ВНК представляет собой слабый короткий импульс тока, что в условиях сильных электромагнитных наводок на установке ИТЭР требует размещение электроники предварительного усиления как можно ближе к детектору. Поэтому электронные компоненты ВНК находятся в порт-камерах, непосредственно за криостатом и биологической защитой. В данной зоне плотность потока нейтронов не ниже $105 \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ в режиме работы 500 МВт, в то время как согласно требованиям международной организации ИТЭР электроника не должна находиться в области, где плотность потока превышает $100 \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$. Поэтому для электронных компонент требуется радиационная защита, обеспечивающей ослабление потока нейтронов как минимум в 1000 раз.

В ходе работы ИТЭР будет происходить активация охлаждающей воды с наработкой изотопа азот-16, который излучает гамма-кванты с энергией около 7 МэВ. При протекании вблизи порт-камер будет происходить облучение электроники. Также в ходе работы будут активироваться стальные конструкции внутри порт-камер. Одним из основных продуктов активации стали является кобальт-60, с периодом полураспада 5 лет и энергией гамма-квантов 1.17 и 1.33 МэВ.

В качестве радиационной защиты электроники предлагается использовать специальный защитный шкаф (shielded cabinet), который должен обеспечивать защиту электронных компонентов как от нейтронного, так и гамма излучений. Мы провели моделирование распространения потока нейтронов и гамма-квантов с помощью кода MCNP и сравнили эффективность ослабления излучения при разных параметрах защитного шкафа. Поскольку угловое распределение нейтронов в области за биологической защитой на данный момент неизвестно, для расчётов источник нейтронов был задан в двух конфигурациях: сферический для оценки “снизу” и плоскопараллельный для оценки “сверху”. На рисунке 1 приведено пространственное распределение удельной плотности потока нейтронов в конструкции шкафа в модели со сферическим источником для энергетического спектра нейтронов в верхнем порту 18 (слева) и нижнем порту 14 (справа).

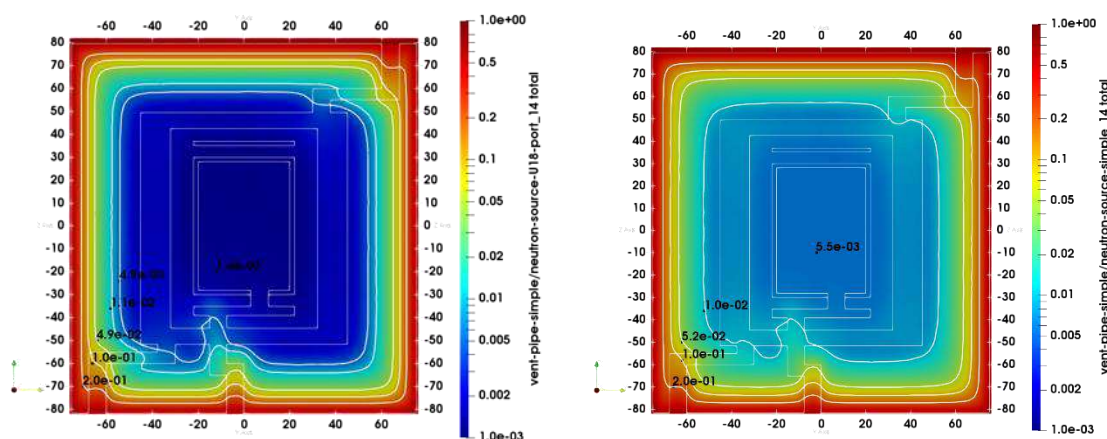


Рис.1 Для оценки ослабления гамма-излучения от активированных конструкций мы рассматривали 2 источника гамма-квантов с энергетическими спектрами радионуклидов кобальт-60 и азот-16. В результате работы были выявлены оптимальные с точки зрения радиационного ослабления параметры защитного шкафа для электроники ВНК.

Литература

1. L. Bertalot, et.al., "Concept design and integration aspects of ITER vertical neutron camera", First EPs Conference on Plasma Diagnostics - 1st ECPD 14-17 April 2015, Villa Mondragone, Frascati (Rome), Italy.
2. MCNP USER'S MANUAL Code Version 6.2, Los Alamos National Laboratory report LA-UR-1729981

УДК 621.791

Вакуум-плотное биметаллическое соединение (CuCrZr-IG/316L(N)-IG) обращённых к плазме компонентов ИТЭР и особенности его изготовления

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

АО «НИИЭФА»

Обращённые к плазме компоненты (ОПК) ИТЭР в составе панелей первой стенки (ППС) и касет дивертора являются одними из самых энергонагруженных компонентов токамака и, чтобы противостоять всем нагрузкам со стороны плазмы, имеют многослойную активноохлаждаемую конструкцию. Обобщенно, можно выделить следующие «слои» в составе такой конструкции: тепловоспринимающий слой (облицовка); теплопередающий/теплоотводящий слой; структурный слой (воспринимающий основные механические нагрузки). Указанные «слои», выполненные из разнородных металлических материалов, необходимо соединить в единую конструкцию, обеспечив выполнение всех требований, предъявляемых к таким соединениям. Речь далее пойдёт о биметаллическом соединении теплопередающего и структурного слоев.

Материал теплопередающего слоя должен обладать наилучшей теплопроводностью, при этом удовлетворять критериям радиационной стойкости и иметь достаточную прочность под действием термомеханических напряжений. Для проекта ИТЭР выбран жаропрочный низколегированный дисперсионно-твердеющий сплав на медной основе (бронза): CuCrZr, имеющий приписку -IG (ITER grade), означающую повышенные требования к содержанию примесей. Для структурного слоя выбран хорошо зарекомендовавший себя в европейской атомной промышленности материал: нержавеющая сталь AISI 316L(N), также с припиской -IG. Химический состав указанных материалов представлен в Таблице 1.

Сплав	Базовые элементы сплава и примеси (вес. %)															
CuCrZr-IG	Cu		Cr		Zr		O			Другие эл-ты			Всего др. эл-ов			
	осн.		0.6 – 0.9		0.07-0.15		Макс. низкое			Co < 0.05			< 0.1			
	Fe	C	Mn	Si	P	S	Cr	Ni	Mo	N	Cu	B	Co	Nb	Ta	Ti

316L(N)-IG	осн.	0.030	1.60-2.00	0.50	0.025	0.010	17.00 - 18.00	12.00 - 12.50	2.30 - 2.70	0.060 - 0.080	0.30	0.0020	0.05	0.01	0.01	0.10

Таб.1. Химический состав CuCrZr-IG и 316L(N)-IG

Было разработано и протестировано несколько способов получения биметаллического соединения CuCrZr-IG/316L(N)-IG для ОПК: диффузионная сварка в условиях горячего изостатического прессования (ГИП) [1], сварка взрывом, вакуумная наплавка медного сплава на сталь [2]. В настоящий момент в ОПК ИТЭР используются первые два из указанных выше способов. При этом требования, предъявляемые к биметаллическому соединению, различаются в зависимости от конструкции компонента и связанных с этой особенностью эксплуатации соединения. В одном случае (нормальнонагруженные ППС), теплоноситель течёт внутри стальной трубки, погружённой в матрицу из медного сплава, которая в данном случае обеспечивает более равномерное тепловое нагружение трубки по периметру. В другом случае (высоконапряжённые ППС, центральные сборки дивертора) теплоноситель омывает непосредственно теплопередающий слой, имеющий специальную структуру - интенсификатор теплообмена (гипервапотрон [3]), в результате чего, по технологическим соображениям, рассматриваемое биметаллическое соединение становится границей раздела вода-вакуум и должно обладать требуемой вакуумной плотностью. Требования, предъявляемые к такому соединению, представлены в Таблице 2. При этом необходимые механические свойства бронзы приобретаются при последующей комплексной термической обработке (ТО) на прочность, включающей операции закалки на пересыщенный твердый раствор хрома в меди и последующее старение [4].

Параметр	Значение
Размер зерна бронзы $D_{ср}$, мкм	≤ 200
Микротвердость стали, HV	< 300
Прочность бронзы на растяжение σ_B при 20°C / 250°C, МПа	$\geq 280 / 220$
Разрушающее напряжение для соединения при растяжении при 150°C, МПа	≥ 220
Герметичность соединения при 6,0 МПа и 150°C, Па $\times$ м ³ $\times$ с ⁻¹	$\leq 1 \times 10^{-10}$

Таб.2. Требования к биметаллическому соединению CuCrZr-IG/316L(N)-IG

Следует отметить, что в нагруженном изделии граница соединения двух металлов с разными физико-механическими свойствами сама по себе может являться концентратором напряжений. В случае рассматриваемого биметаллического соединения CuCrZr-IG/316L(N)-IG, разница более чем в 22 раза по коэффициенту теплопроводности (318 Вт/м $\times$ К у бронзы и 14,3 Вт/м $\times$ К у стали) приводит к большим температурным градиентам в изделии при быстрых скоростях нагрева/охлаждения. Кроме того, в интервале температур 350...600°C для большинства медных сплавов наблюдается «провал пластичности» [4], что приводит к росту уровня накопленных напряжений, как правило в зоне концентратора напряжений, до разрушения без значительных остаточных деформаций. Указанные факторы (быстрые скорости нагрева/охлаждения, интервал температур 350...600°C) не характерны для условий эксплуатации биметаллического соединения ОПК ИТЭР, однако характерны для процесса производства ОПК, что и привело к случаям возникновения трещин на границе биметаллического соединения [5].

Еще одной особенностью рассматриваемого биметаллического соединения является образование, вследствие термодиффузионных процессов, слоя нитридов циркония вдоль границы соединения [6]. Указанные нитриды образуются в биметаллическом соединении, полученном каждым из перечисленных ранее способов: в случае ГИП, непосредственно в процессе диффузионной сварки; в остальных случаях – в процессе ТО на пересыщенный твердый раствор. Анализ зоны разрушения биметаллического соединения в бракованных изделиях выявил, что слой нитридов циркония является зоной распространения трещины [6]. Однако сравнение результатов испытаний в интервале температур 350...600°C образцов на отрыв биметаллического слоя выявил наличие разрушения по зоне биметаллического соединения, независимо от наличия слоя нитридов циркония. Таким образом степень влияния слоя нитридов на процесс разрушения биметаллического соединения присутствует, но однозначно не определена.

Уменьшить вероятность разрушения биметаллического соединения в процессе производства ОПК ИТЭР возможно благодаря детальной проработке термического цикла всех производственных операций: сварки, ТО для снятия напряжений, ТО на прочность бронзы, пайки (облицовки) и др. При этом, оптимальный термический цикл должен обеспечивать достижение всех требований к соединению (см. Таблица 2), не увеличивая уровень напряжений в изделии.

Литература

1. Пискарев П.Ю. и др. Отработка технологии горячего изостатического прессования вакуумно-плотного биметаллического соединения внутрикамерных компонентов ИТЭР // Инновационные проекты и технологии ядерной энергетики: сб. докладов V Международной научно-технической конференции. – М.: Изд-во АО «НИКИЭТ», 2018. – с. 963-970.
2. A. Gervash, I. Mazul, N. Yablokov, Study of Alternative SS/Cu-Alloy Joining Methods for ITER // Fusion Engineering and Design, 56-57 (2001) 381-384.
3. Escourbiac F., Bobin-Vastra I., Kuznetsov V., Missirlian M., Schedler B., Schlosser J. A mature industrial solution for ITER divertor plasma facing components: HyperVapotron cooling concept adapted to Tore Supra flat tile technology. Fusion Engineering and Design (2005), Vol. 75–79, p. 387–390.
4. А.К. Николаев, С.А. Костин. Медь и жаропрочные медные сплавы: энциклопедический терминологический словарь: фундаментальный справочник. – М.: Издательство ДПК Пресс, 2012. – 720с.
5. П.Ю. Пискарев и др. Исследование причин разрушения вакуумно-плотного биметаллического соединения CuCrZr-IG/316L(N)-IG ОПК Первой стенки // Труды 62-й Всероссийской научной конференции МФТИ. Фундаментальная и прикладная физика. – М.: МФТИ, 2019. – с. 372-375.
6. Пискарев П.Ю. и др. Образование хрупких слоев в процессе горячего изостатического прессования компонентов ИТЭР // XLVI Международная Звенигородская конференция по физике плазмы и УТС: сборник тезисов докладов. – М.: ЗАО НТЦ «ПЛАЗМАИОФАН», 2019. – с. 259.

УДК 533.922

Влияние инжекции азота на экранирование вольфрамовой мишени при воздействии мощного потока водородной плазмы

С.Д. Лиджигорьев^{1,2}, В.А. Костюшин¹, И.М. Позняк^{1,2}, В.М. Сафронов^{1,2,3}, Д.А. Топорков¹

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

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Частное учреждение Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом»
«Проектный центр ИТЭР»

Цель данной работы заключается в изучении влияния инжекции азота на экранировку вольфрама при воздействии мощного потока водородной плазмы в магнитном поле. Постановка эксперимента является очередным шагом в исследованиях по созданию источников мягкого рентгеновского излучения на базе импульсных плазменных ускорителей [1]. Получаемые экспериментальные результаты также могут представлять интерес для разработки концепции диссипативного девертора ИТЭР [2].

На рис.1 представлена схема эксперимента на установке МКТ (ТРИНИТИ). Водородный плазменный поток со скоростью $(4\div 6) \times 10^7$ см/с и энергосодержанием до 40 кДж создается импульсным плазменным ускорителем. Вольфрамовая мишень располагается в продольном магнитном поле, перпендикулярном фронтальной плоскости вольфрама, с индукцией до 2 Тл. Плотность энергии в потоке водородной плазмы перед мишенью варьируется в диапазоне $40\div 400$ Дж/см². Сверхзвуковая газовая струя азота формируется с использованием плоского сопла Лавала. Максимальная плотность газа в струе достигает 10^{17} см⁻³ при толщине струи ≈ 5 см и ширине ≈ 15 см.

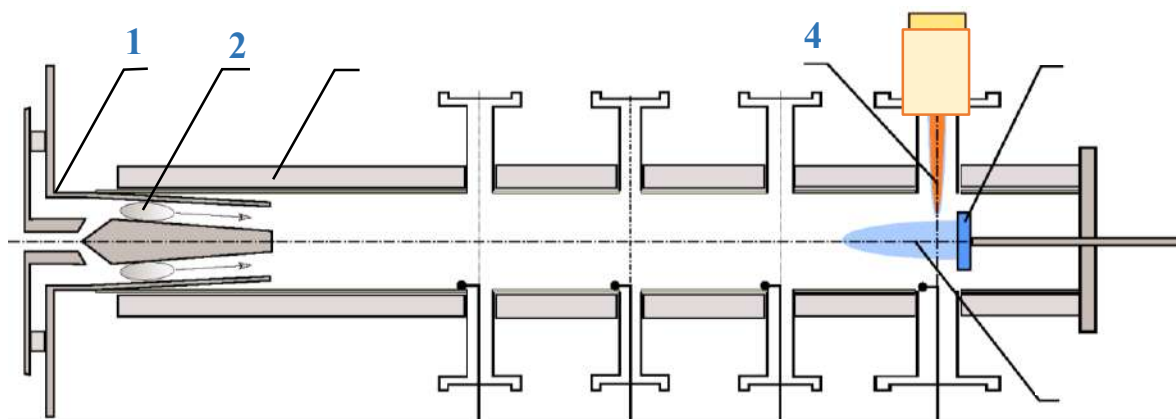


Рис. 1. Схема эксперимента на установке МКТ.

1 – импульсный плазменный ускоритель, 2 – ускоряемая плазма, 3 – соленоиды, 4 – газовая струя, 5 – твердотельная мишень, 6 – мишенная плазма

Многокадровая съемка в мягком рентгеновском диапазоне излучения плазмы, образующейся при взаимодействии водородной плазмы, газовой струи и вольфрамовой мишени осуществляется через многодырочную камеру-обскуру, оснащенную МКП-камерой. Для регистрации спектров излучения в диапазоне $1\div 70$ нм с пространственно-временным разрешением используется спектрометр с пропускающей решеткой. Численное моделирование экспериментальных рентгеновских спектров позволяет оценивать электронную температуру плазмы [3]. С помощью многоканального калориметра измеряется энергия, поглощаемая вольфрамовой мишенью.

На рис. 2 представлены первые результаты рентгеноспектральных измерений излучения мишенной плазмы, образующейся при воздействии потока водородной плазмы на вольфрамовую мишень с азотной газовой струей на расстоянии 5 см перед фронтальной поверхностью мишени.

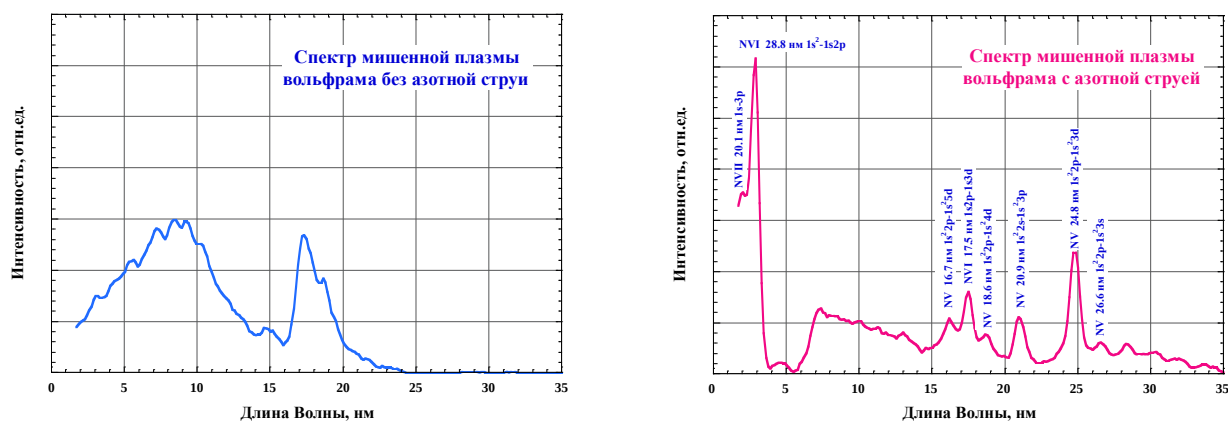


Рис. 2. Спектр излучения мишенной плазмы перед вольфрамом.

Период пропускающей дифракционной решетки 500 нм. Экспозиция МКП-камеры 4 мкс.

Согласно калориметрическим измерениям, инъекция азота привела к заметному снижению энергии, поглощенной вольфрамом: с 41 Дж/см^2 до 32 Дж/см^2 . Однако радикальные изменения произошли со спектром мишенной плазмы и, соответственно, с ее ионным составом. В диапазоне до 35 нм наблюдаются только линии ионов азота – от Li-подобного до H-подобного, что свидетельствует об отсутствии вольфрама в составе мишенной плазмы при инъекции азота.

Эксперименты по воздействию газовой струи азота на паровую экранировку вольфрама будут продолжены с варьированием плотности и скорости плазмы потока и плотности газовой струи. Будет проведено численное моделирование рентгеновских спектров излучения мишенной плазмы для определения электронной температуры. Планируется использовать абсолютно калиброванные рентгеновские фотодиоды ФДУК-8УВС для измерения мощности излучения мишенной плазмы.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 18-29-21013 и № 20-21-00153).

Литература

1. V.V. Gavrilov, A.M. Zhitlukhin, D.M. Kochnev, V.A. Kostyushin, I.M. Poznyak, S.A. Pikuz, S.N. Ryazantsev, I.YU. Skobelev, D.A. Toporkov // Soft X-ray radiation sources based on high-energy plasma flow thermalization with gas and solid-state targets // 7th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE-2020 online), Tomsk, 2020, p.193
2. А. А. Пшенов, А. С. Кукушкин, С. И. Крашенинников // Влияние поперечного переноса в диверторной области на излучение инжектируемой примеси и переход в режим детачмента // Физика плазмы, 2020, том 46, № 6, с. 483–494
3. В. В. Гаврилов, А. Г. Еськов, А. М. Житлухин, Д. М. Кочнев, С. А. Пикуз, И. М. Позняк, С. Н. Рязанцев, И. Ю. Скобелев, Д. А. Топорков, Н. М. Умрихин // Мощное линейчатое рентгеновское излучение плазмы, образующейся при столкновении высокоэнергетичных плазменных потоков // Физика плазмы, 2018, том 44, № 9, с. 730–739

УДК 544.228

Влияние состава на структуру, термоэлектрические свойства и термостабильность материалов на основе антимонида цинка

А.А. Рожина

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Полупроводниковые термоэлектрические материалы широко используются в генераторах, холодильниках, термостатах, кондиционерах и других устройствах. Основные энергетические характеристики термоэлектрических устройств определяются термоэлектрической эффективностью. Термоэлектрические материалы подразделяются по температурной области их применения на низкотемпературные ($T < 300^\circ\text{C}$), среднетемпературные ($300^\circ\text{C} < T < 600^\circ\text{C}$) и высокотемпературные ($T > 600^\circ\text{C}$). Единого термоэлектрического материала, эффективного во всех температурных диапазонах, не существует. Эффективность различных термоэлектрических материалов достигает максимальных величин в довольно ограниченной температурной области.

Одним из перспективных термоэлектрических материалов в области средних температур (от комнатной до 600°C) р-типа является β -фаза антимонида цинка [1,2]. Однако, одной из главных проблем является нестабильность этого материала при нагреве даже в инертной атмосфере.

В работе проведено исследование влияния условий синтеза на структуру и термоэлектрические свойства материалов на основе антимонида цинка. Рассмотрены вопросы о влиянии избыточного Zn и режимов искрового плазменного спекания на фазовый состав и стабильность свойств полученного материала.

Показано, что фазовый состав образцов после синтеза отличался в зависимости от содержания избыточного цинка в образцах. Были получены однофазные образцы, содержащие только фазу Zn_4Sb_3 и двухфазные образцы, содержащие кроме фазы Zn_4Sb_3 вторую фазу металлического Zn. После искрового плазменного спекания дополнительную фазу чистого цинка не наблюдали, а параметры решетки фазы Zn_4Sb_3 увеличились по сравнению с параметрами фазы после синтеза. Такое изменение структуры может быть связано с увеличением концентрации межузельных атомов цинка в образце.

Получены температурные зависимости удельной проводимости, коэффициента Зебека и теплопроводности образцов антимонида цинка с разным содержанием избыточного цинка. Показано, что значения проводимости и теплопроводности образцов уменьшаются с ростом температуры в области от 25°C до 400°C . Значения коэффициента Зебека у всех образцов увеличиваются с повышением температуры.

Максимальные значения термоэлектрической эффективности $ZT \sim 1.2$ при температуре 400°C были получены для однофазного образца $\text{Zn}_{4.1}\text{Sb}_3$.

Литература

1. T. Caillat, J.P. Fleurial, and A. Borshchevsky, J. Phys. Chem. Solids 58, 1119 (1997).
2. E.S. Toberer, P. Raewel, S. Gariel, J. Tafto, and G.J. Snyder, J. Mater. Chem. 20, 9877 (2010).

Измерение дифракционной эффективности голографических дифракционных решеток, используемых в двухканальном спектрометре-полихроматоре высокого разрешения для активной спектроскопии плазмы на установке ИТЭР

Е.А. Димитриева^{1,2}, Н.В. Кузьмин², С.Н. Тугаринов²

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

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

Управление работой реактора ИТЭР требует разработки и создания необходимых средств диагностики термоядерной плазмы. Одним из них является так называемый метод активной спектроскопии. Активная спектроскопия (Charge Exchange Recombination Spectroscopy – CXRS) с использованием диагностического или нагревного пучка атомов широко используется практически на всех современных токамаках [1, 2]. Активная спектроскопия позволяет измерять такие параметры, как ионная температура, скорость тороидального и полоидального вращения плазмы, концентрация легких примесей (в том числе гелиевой золы) по всему сечению плазменного шнура с высоким пространственным разрешением.

На установке ИТЭР для осуществления АС диагностики необходимо проводить измерения в трех спектральных диапазонах (468 ± 6 нм, 529 ± 6 нм и 656 ± 8 нм). При этом для измерения полуширины спектрального профиля линии, спектрального сдвига и интегральной интенсивности линий необходимо иметь высокое спектральное разрешение. Вдобавок для необходимого соотношения сигнал/шум при измерениях на ИТЭР требуется высокая светосила.

В результате исследовательских работ была предложена оптическая схема трехдиапазонного спектрометра [3], планируемого для использования как для диагностики плазмы ИТЭР, так и для экспериментов по активной спектроскопии на токамаке EAST [4]. Данная схема представляет собой три последовательные прозрачные голографические дифракционные решетки (ГДР), расположенные друг за другом: первая решетка эффективна для диапазона длин волн 468 ± 6 нм, вторая – для 529 ± 6 нм, третья – для 656 ± 8 нм. При этом остальное излучение проходит дальше сквозь прозрачные решетки. Углы падения и дифракции для всех трех решеток составляют $60 \pm 1^\circ$.

С ГДР, входящими в состав спектрометра, были проведены лабораторные тесты для измерения дифракционной эффективности на рабочих длинах волн, а также эффективности прошедшего сквозь решетку излучения (нулевой порядок дифракции) в случае неполяризованного света.

В докладе описывается измерение дифракционной эффективности ГДР на разных длинах волн. Для измерений использовались полупроводниковые лазеры с длинами волн 473, 532 и 656 нм, а также измерительный комплекс Ophir Nova с полупроводниковым светочувствительным диодом Ophir PD-300. Технические характеристики всех дифракционных решеток исследовались на трех длинах волн. ГДР имеют высокую плотность штрихов (порядка 3000 штр/мм), поэтому эффективность решеток зависит от поляризации излучения. На установке ИТЭР решетки будут работать в естественном (неполяризованном) излучении. Так как полупроводниковые лазеры, используемые в работе, на выходе дают линейно поляризованное излучение, то в следствие этого измерения проводились для излучения, имитирующего естественное, и поляризация лазерного излучения была ориентирована под углом 45° .

Литература

1. Диагностика плазмы / Под ред. М.И. Пергамент. М.: Энергоатомиздат, 1990. Вып. 7. С. 56–111.
2. Von Hellermann M.G., Mandl W., Summers H.P., Weisen H., Boileau A., Morgan P.D., Morsi H., Koenig R., Stamp M.F., Wolf R. // Rev. Sci. Instrum. 1990. V. 61. № 11. P. 3479; <http://dx.doi.org/doi.10.1063/1.1141975>
3. С. Н. Тугаринов, А. А. Белокопытов, Д. М. Кулаков, А. В. Лукин, Н. Н. Науменко, Ф. А. Саттаров, В. В. Серов, М. А. Усольцева, Ф. О. Хабанов, Н. М. Шигапова, В. П. Ярцев // Трехдиапазонный спектрометр высокого разрешения для диагностической системы «Активная спектроскопия», 2016.
4. Y.Y.Li, X.H. Yin, J. Fu, D. Jiang, S.Y. Feng, B. Lyu, Y.J. Shi, Y.Yi, X.J. Zhou, C.D. Hu, M.Y. Ye, and B.N. Wan, “First measurement of the edge charge exchange recombination spectroscopy on EAST tokamak”, Review of Scientific Instruments 87, 11E501 (2016); <https://doi.org/10.1063/1.4955279>

Исследование свойств газовой завесы как метода защиты стенок термоядерного реактора

*А.И. Румянцева^{1,2}, И.М. Позняк^{1,2}, Д.А. Топорков², В.М. Сафронов^{1,2,3}, В.Ю. Цыбенко²,
В.А. Костюшин², Д.М. Кочнев², З.И. Новоселова^{1,2}, Е.Д. Федулаев^{1,2}, С.В. Карелов²*

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

²Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований,

³Проектный центр ИТЭР

Воздействие интенсивных потоков плазмы на облицовочные покрытия вакуумной камеры ИТЕР будет приводить к эрозии материалов и, как следствие, значительному сокращению времени их службы [1]. Для уменьшения тепловой нагрузки на поверхность может применяться такой способ защиты как газовая завеса. Суть данного метода состоит в том, что, предупреждая срыв, перед защитными пластинами напускают тяжелый газ, преобразующий энергию налетающего на стенку плазменного потока в излучение, тем самым уменьшая тепловую нагрузку на поверхность.

Условия, ожидаемые при эксплуатации облицовочных покрытий вакуумной камеры ИТЭР, лежат далеко за пределами возможностей современных токамаков. Поэтому для испытаний материалов в лабораторных условиях применяют электронные и ионные пучки, лазеры, импульсные и квазистационарные плазменные ускорители.

Целью данной работы является исследование параметров газовой завесы, создаваемой при истечении азота в вакуум вблизи поверхности защитных покрытий. В форкамерный объем плоского сопла Ловаля с помощью высокоскоростного электродинамического клапана инжектируется азот, который затем проходит через критическое сечение сопла с размерами 300 мкм на 100 мм.

Эксперименты проводились на установке МК-200UG. В ходе экспериментов были измерены давление $p(t)$ и плотность $n(t)$ газа на выходе из клапана в зависимости от давления в подклапанном объеме p_0 . Величина p_0 варьировалась в диапазоне 10 – 70 атм. Давление $p(t)$ регистрировалось с помощью пьезоэлектрического датчика (рис. 1), чувствительная площадка которого смотрела навстречу газовому потоку. Плотность газа с пространственным и временным разрешением измерялась с применением интерферометра Маха-Цендера. В качестве осветителя использовался He-Cd лазер ($\lambda = 441,6$ нм) мощностью 70 мВт. Регистрация интерферограмм осуществлялась высокоскоростным фоторегистратором ВФУ-1.

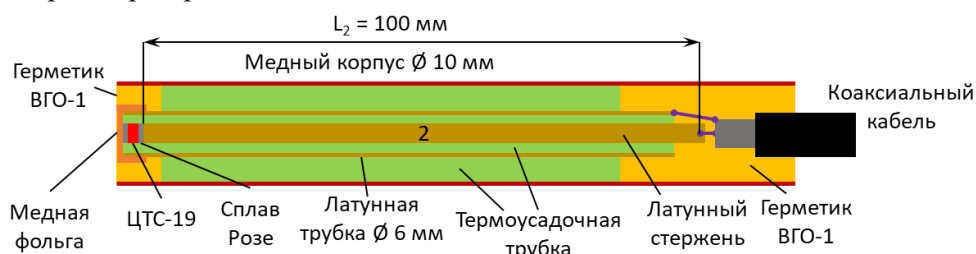


Рис.1. Устройство датчика давления

Типичный сигнал датчика, установленного на расстоянии 35 см от выхода из клапана, представлен на рис. 2а. Красным цветом показаны результаты, полученные на оси газового потока, синим – на расстоянии 60 мм от оси. Время, за которое срабатывает клапан и азот доходит до датчика давления, составляет $t_0 \approx 750$ мкс. При давлении в подклапанном объеме $p_0 = 70$ атм максимальное давление в потоке $p_{\max}$ равно 1,7 атм. Сигнал с датчика возрастает достаточно резко при измерениях на оси, при смещении в сторону фронт газового импульса становится более пологим (синяя кривая).

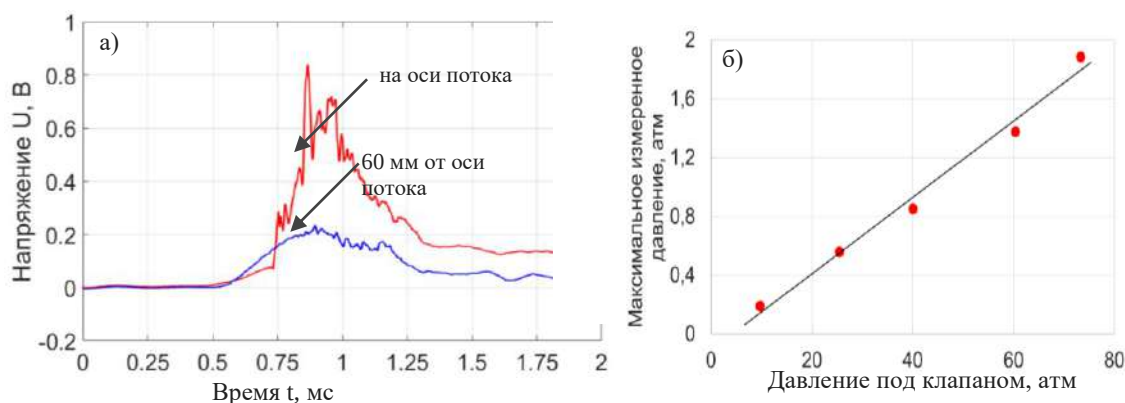


Рис.2. Давление на оси газового потока (а), зависимость максимального давления от давления в подклапанном объеме (б)

Максимальное давление в потоке $p_{\max}$ прямо пропорционально давлению в подклапанном объеме p_0 – рис.2б. При варьировании p_0 в диапазоне 10 – 70 атм величина $p_{\max}$ возрастает от 0,2 до 1,9 атм. При смещении датчика на 60 мм к периферии (синяя кривая) амплитуда сигнала спадает примерно в 4 раза, а длительность воздействия практически не меняется.

На рис. 3 приведена типичная интерферограмма (а) газовой струи на расстоянии 35 см от клапана и результат ее обработки (б). Видно, что плотность азота доходит до $n = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Газ заполняет поле зрения интерферометра к моменту времени ≈ 850 мкс, что согласуется с результатами измерений с помощью датчика давления.

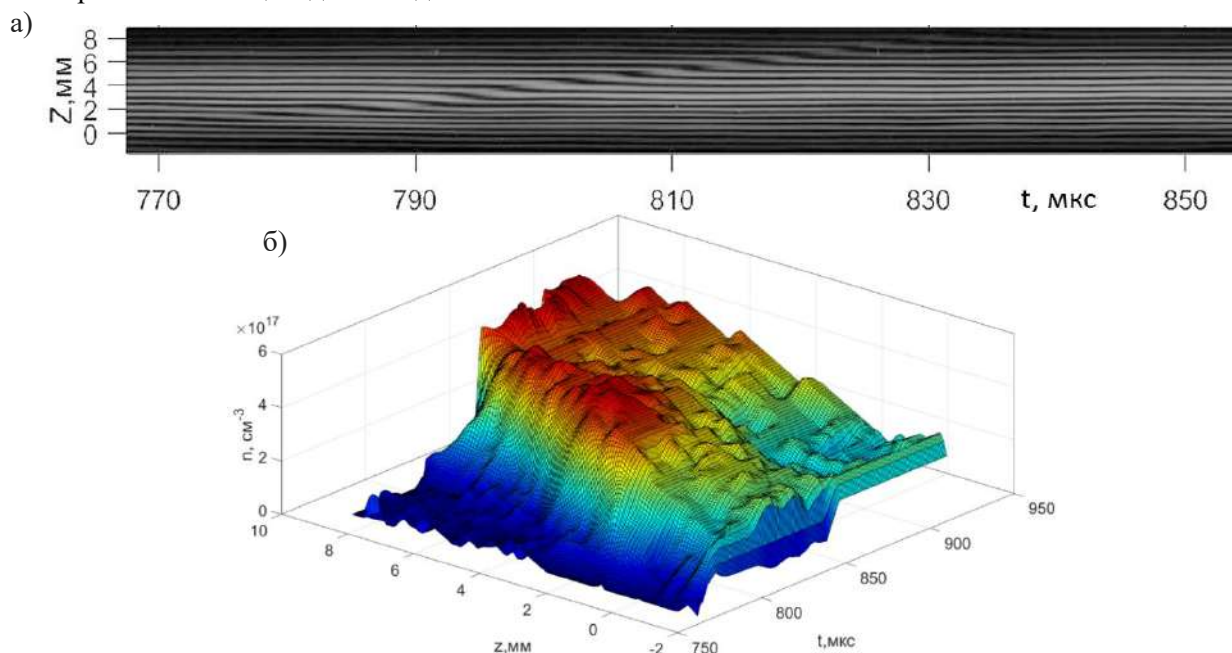


Рис.3. Интерферограмма (а) и результат ее обработки (б)

На следующем этапе работы предстоит измерить распределения давления и плотности азота на выходе из плоского сопла Ловаля. Это позволит контролировать параметры газовой завесы путем изменения давления в подклапанном объеме и момента срабатывания клапана по отношению к запуску плазменной установки.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №18-29-21013 и №20-21-00153).

Литература

1. Pitts R.A., Bonnin X., Escourbiac F. et al. Physics basis for the first ITER tungsten divertor // Journal of Nuclear Materials. – 2019. – V.20.

Моделирование эффекта гало и оценка его влияния на работу активной спектроскопической диагностики для установки ИТЭР

Г.С. Павлова^{1,2}, С.В. Серов², С.Н. Тугаринов², М. von Hellermann³

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Частное учреждение Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом»

«Проектный центр ИТЭР»

³ITER Organization

Для измерения параметров плазмы, таких как концентрация гелия и легких примесей n_z , их температура T_i и скорость вращения ω , на установке ИТЭР будет использоваться активная спектроскопическая диагностика, обозначаемая в англоязычной литературе аббревиатурой CXRS (Charge eXchange Recombination Spectroscopy) [1, 2]. Принцип ее работы состоит в анализе перезарядочного излучения ионов рабочего газа и примесей, которое возбуждается высокоэнергетическими атомами пучка, инжектируемого в плазму.

Регистрируемый спектр состоит из нескольких спектральных контуров (см. рис. 1), включая линию активной перезарядки, в которой содержится искомая информация об ионной компоненте плазмы. Инжекция высокоэнергетического пучка атомов водорода приводит к образованию т.н. облака атомов «гало» вокруг области прохождения диагностического пучка через плазму. Наличие эффекта гало усложняет выделение линии активной перезарядки из спектра, так как он приводит к искажению наблюдаемой линии активной перезарядки [3, 4]. Также этот эффект приводит к ухудшению локализации измерений.

С помощью кода Simulation of Spectra (SOS) методами, описанными в работе [5], было проведено моделирование эффекта гало для четырех примесей (He, C, Be, Ne) и рабочего газа (D) для основных сценариев работы установки ИТЭР. Общий вид модельного спектра для линий He и Be показан на рисунке 1, а спектральная линия, возникающая из-за эффекта гало, вместе с линией активной перезарядки для D (случай D-T разряда) показаны на рисунке 2. Оба рисунка приведены для случая середины радиуса плазменного шнура.

С помощью моделирования был оценен вклад излучения, вызванного эффектом гало, в интенсивность наблюдаемой линии активной перезарядки. Показано, что этот вклад не превышает 20% для примесей и достигает 60% для рабочего газа. Кроме того, было исследовано влияние этого эффекта на форму линии активной перезарядки. Оказалось, что он почти не искажает гауссовую форму этой линии. Также представляет интерес исследование влияния эффекта гало на пространственное разрешение диагностики. Было получено, что этот эффект может заметно сказаться на пространственном разрешении, ухудшая его в два раза для середины радиуса плазменного шнура для линии D-alpha, что проиллюстрировано на рис. 3. В итоге можно сделать вывод, что эффект гало необходимо учитывать и моделировать при обработке данных, полученных с помощью активной спектроскопической диагностики на ИТЭР.

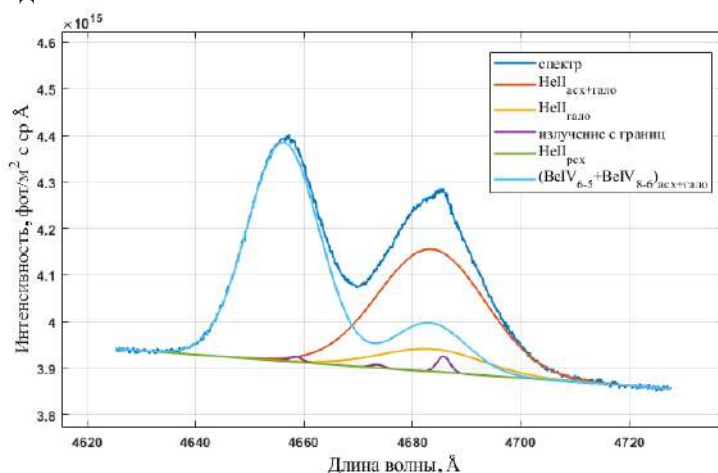


Рис. 1. Модельный спектральный профиль для линий He и Be и его разложение по компонентам.

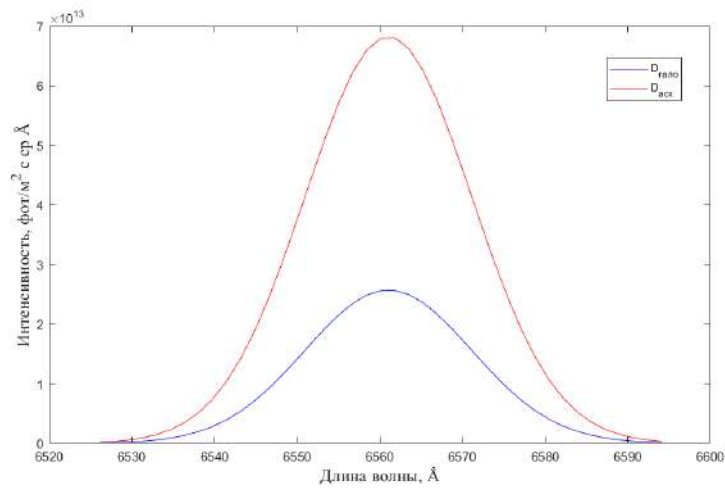


Рис. 2. Спектральный профиль линии активной перезарядки дейтерия (АСХ) и спектральный профиль соответствующей линии гало, полученные с помощью моделирования.

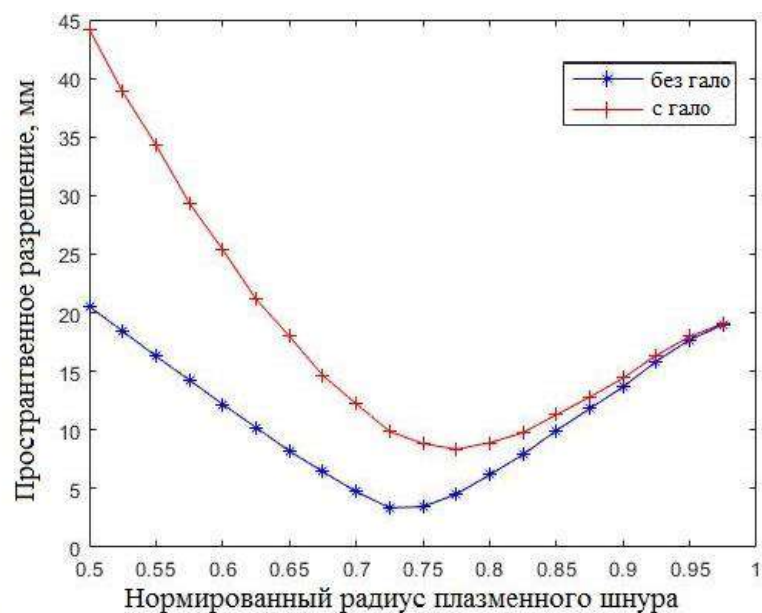


Рис. 3. Зависимость пространственного разрешения диагностики с учетом эффекта гало и без его учета от радиуса плазменного шнура.

Литература

1. С. Н. Тугаринов и др. Разработка концепции активной спектроскопической диагностики с использованием диагностического пучка атомов, применительно к установке ИТЭР // Физика плазмы. — 2004. — т. 30, № 2. — с. 147—154.
2. С. В. Серов, С. Н. Тугаринов, М. Von Hellermann. Моделирование спектров излучения плазмы ИТЭР с использованием кода ADAS для диагностики активной спектроскопии // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. — 2018. — т. 41, № 2. — с. 89—94.
3. J. T. Hogan. Calculation of hydrogen density in toroidal plasma // Journal of Nuclear Materials. — 1982. — Vol. 111/112. — P. 413—419.
4. B. A. Grierson et al. Active spectroscopic measurements of the bulk deuterium properties in the DIII-D tokamak (invited) // Review of Scientific Instruments. — 2012. — Vol. 83, no. 10. — P. 10D529.
5. M. von Hellermann et al. Simulation of Spectra Code (SOS) for ITER Active Beam Spectroscopy. — B: Atoms 7.1, 2019. — doi: 10.3390/atoms7010030.

Применение хордовой инъекции в плазму токамака.

О.Е. Новоходская, В.Г. Капралов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Одними из наиболее интересных областей для изучения процессов переноса и режимов удержания горячей плазмы являются области с большими значениями градиентов концентрации и температуры. В таких областях возникает сильное радиальное электрическое поле, что приводит к увеличению ширины полоидального вращения плазмы. Увеличение ширины, в свою очередь, приводит к частичному подавлению механизмов радиального переноса [1]. Другой проблемой являются срывы плазменного разряда и формирование в них пучков убегающих электронов.

Одним из новых способов формирования области с сильным градиентом концентрации является хордовая инъекция топливных макрочастиц в плазму токамака. Инжекцию можно производить как в полоидальном, так и в тороидальном направлении. Полоидальное направление предпочтительнее, т.к. испарение макрочастицы происходит в поле зрения диагностик, установленных в сечении инъекции.

На токамаке Т-10 использовался комплекс инъекции макрочастиц, который позволял выполнять различные варианты инъекции водородных и примесных макрочастиц, фото- и видеорегистрацию их испарения в плазме [2], влиять на режимы удержания частиц в плазме [1, 3], применять инъекцию для управления срывом плазменного разряда [4], а также осуществлять нецентральную хордовую инъекцию [5] для формирования областей с резким градиентом концентрации плазмы.

Система хордовой инъекции была установлена в диагональный порт $+30^\circ$. Через этот же порт выполнялась и центральная инъекция для сравнения с хордовой инъекцией. Система хордовой инъекции позволяла отклонять макрочастицы в вертикальной плоскости и изменять прицельный параметр инъекции. Причем, отклонение возможно в обе стороны, что соответствует инъекции по (ко-пеллет-инжекция) и против (контр-пеллет-инжекция) вращения плазмы.

Выполненные эксперименты по хордовой инъекции в токамак Т-10 [3] показали, что для хордовой инъекции увеличивается длительность усиленного свечения линии $\text{D}\alpha$. В части импульсов осуществлялся ЭЦР нагрев плазмы.

Также на токамаке Т-10 были выполнены эксперименты, в которых срыв плазменного разряда мог быть принудительно вызван пеллет-инжекцией или массивным газонапуском. В них было выполнено сравнение различных вариантов принудительного завершения плазменного разряда: срыв по предельной плотности, пеллет-инжекция и массивный газонапуск рядом с плазмой и вдали от нее [4].

В результате экспериментов получили последовательность вариантов принудительного срыва по увеличению его жесткости, с точки зрения воздействия на элементы конструкции токамака, именно, срыв по предельной плотности за счет штатный газонапуска, массивный газонапуск в дальней зоне, массивный газонапуск в ближней зоне и, наконец, пеллет-инжекция.

Авторы благодарят коллектив установки Т-10 за предоставленные данные и поддержку.

Литература

1. Капралов В.Г., Рожанский В.А., Хлопенков К.В. Режим улучшенного удержания в токамаке т-10, вызванный инъекцией медленного водородного пеллета // Письма в Журнал технической физики. 1995. Т.21. №6. С.57.
2. Egorov S.M., Galkin V.A., Kapralov V.G., et al., Pellet ablation study in t-10 using a photographic technique // Proc 13 Int Conf Plasma Phys Controlled Nucl Fusion Res. 1991. P.599.
3. Ryzhakov D.V., et al. The regime of the improved confinement with deuterium pellet injected into plasmas of tokamak T-10 with W and Li limiters // Journal of Physics: Conference Series 2017. V. 907. I.1. 012004.
4. Dremine M. M., Kakurin A.M., Kapralov V.G., et al., Effect of noble gas injection on discharge disruption in T-10 tokamak // Problems of Atomic Science and Tech., Ser. Th. Fusion, 2012. V.4. P.58.
5. Kapralov V.G., Pavlov Yu.D., Borovov A.E., et al., Co- and counter-pellet-injection in T-10 tokamak // Journal of Physics: Conf. Series. 2017. V.907. I.1. 012003.

Расчет функций отклика детекторов Вертикальной Нейтронной Камеры ИТЭР

П.А. Ревякин¹, Д.А. Кумпилов^{1,2}, Р.Н. Родионов², Т.М. Кормилицын^{1,2}, Г.Е. Немцев²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Частное учреждение “ИТЭР-Центр”

Вертикальная Нейтронная Камера (ВНК) – диагностическая система ИТЭР, предназначенная для измерения профиля нейтронного источника в полоидальном сечении плазмы, а также ионной температуры [1]. ВНК состоит из 6 верхних и 5 нижних коллиматоров. В конце каждого коллиматора расположен Блок Детектирования Быстрых Нейтронов (БДБН), включающий по две ионизационные камеры деления с радиатором из ^{238}U и два алмазных детектора разных чувствительностей.

Для решения задачи восстановления профиля нейтронного источника необходимо решить задачу расчета плотности потока нейтронов в каждом измерительном канале. В месте расположения детекторов ВНК ожидается неоднородное пространственное распределение энергетического спектра в широком диапазоне энергий нейтронов. Для определения плотности потока нейтронов используются ИКД, которые представляют собой протяженный детектор. Алмазные детекторы дают дополнительную информацию об энергетическом распределении нейтронов, которое связано с ионной температурой плазмы. Поэтому стоит задача определения отклика детекторов ВНК на излучение источника с известными параметрами. В качестве таких источников предлагается использовать нейтронные генераторы НГ-24М и ИНГ07Д, которые в плоскости, перпендикулярной мишени дают близкое к моноэнергетическому распределение. Для получения достаточной для статистической обработки скорости счёта необходимо располагать БДБН достаточно близко к мишени нейтронного генератора, где пространственное распределение плотности потока нейтронов существенно неоднородно. Для адекватной интерпретации экспериментальных значений скорости счёта ИКД необходимо учесть эту неоднородность.

Для расчёта отклика детекторов сперва была создана MCNP-модель экспериментального стенда, источника нейтронов и БДБН и рассчитана средняя по объёму плотность потока нейтронов в точках расположения кристаллов алмаза и электродов ИКД. Амплитудный спектр отклика алмазного детектора получен с помощью предварительно рассчитанной в Geant4 функции отклика. На рисунке 1 приведены амплитудные спектры алмазных детекторов БДБН с кристаллами размером $4,5 \times 4,5 \times 0,5 \text{ мм}^3$ и $3,0 \times 3,0 \times 0,3 \text{ мм}^3$. Скорость счёта ИКД получена пересчётом рассчитанной в MCNP скорости реакций деления.

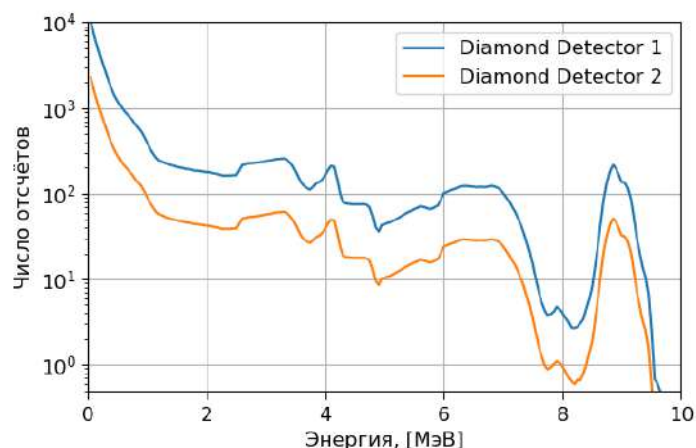


Рис. 1. Амплитудные спектры алмазных детекторов БДБН

Литература

1. *L. Bertalot, et.al.*, “Concept design and integration aspects of ITER vertical neutron camera”, First EPS Conference on Plasma Diagnostics - 1st ECPD 14-17 April 2015, Villa Mondragone, Frascati (Rome), Italy.

Спектральные характеристики парового экранирующего слоя в диапазоне 5 – 70 нм при облучении вольфрама интенсивными потоками плазмы

*Е.Д. Федулаев^{1,2}, И.М. Позняк^{1,2}, Д.А. Топорков², В.М. Сафронов^{1,2,3}, В.Ю. Цыбенко²,
В.А. Костюшин², Д.М. Кочнев², З.И. Новоселова^{1,2}, А.И. Румянцева^{1,2}, С.В. Карелов²,
Д.В. Коваленко², А.Д. Ярошевская²*

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

²Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований,

³Проектный центр ИТЭР

При работе токамаков на защитные покрытия вакуумной камеры могут воздействовать мощные плазменно-тепловые потоки, возникающие в результате периферийной локальной неустойчивости и срывов тока. Это повлечет быструю эрозию материалов и значительное сокращение срока их службы. Исследование данных процессов проводится в лабораториях с применением плазменных ускорителей, лазеров, электронных и ионных пучков.

Особый интерес вызывает эффект паровой экранировки вольфрама, заключающийся в возникновении экранирующего парового слоя при мощном плазменно-тепловом воздействии на защитные покрытия [1]. Исследование данного эффекта проводится на плазменной установке МК-200UG. В ходе предшествующих этапов работы были определены параметры плазменного потока ускорителя [2] и измерена динамика формирования и развития экранирующего слоя [3].

Цель данной работы – определить параметры излучения экранирующего плазменного слоя в мягком рентгеновском (МР) и вакуумном ультрафиолетовом (ВУФ) диапазонах. Вольфрамовая мишень облучалась интенсивными потоками водородной плазмы на установке МК-200UG в условиях, характерных для переходных процессов в ИТЭР.

Излучение примешенной плазмы в диапазоне 5 – 70 нм исследовалось с помощью спектрографа на основе пропускающей дифракционной решетки – рисунок 1. Спектрограф состоит из двух коллимирующих (В, G) и изображающей щели (I), дифракционной решетки и фоторегистратора – высокоскоростной МКП-камеры. На входе камеры формируется спектрограмма с пространственным разрешением вдоль направления движения плазменного потока. Спектрометр откалиброван по спектру азота.

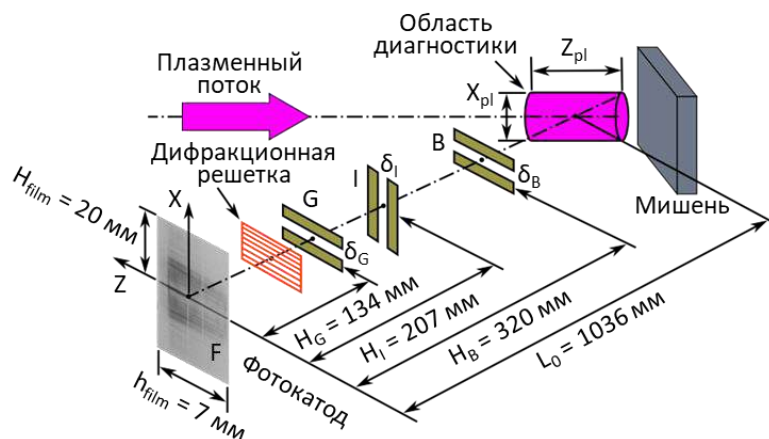


Рис.1. Спектрометр на основе пропускающей дифракционной решетки

Для обработки полученных результатов была написана специальная программа, которая при помощи итерационного метода вычитает из дифракционной картины вторые и более высокие порядки дифракции. Ионный состав плазмы определялся путем сопоставления экспериментальных спектров со спектральными данными из базы ADAS [4].

Тепловая нагрузка на мишень в ходе эксперимента варьировалась от $q = 3,5 \text{ МДж/м}^2$ до $q = 9 \text{ МДж/м}^2$, при характерной длительности воздействия 15 мкс. Спектрограммы регистрировались на различных расстояниях до мишени z ($z \leq 220 \text{ мм}$). В ходе анализа полученных данных установлено:

1) При плотности потока энергии $q = 3,5 \text{ МДж/м}^2$ на спектре виден лишь нулевой порядок дифракции. Свечение мишенной плазмы появляется при $q = 5,3 \text{ МДж/м}^2$, а интенсивное испарение вольфрама происходит при $q \geq 8 \text{ МДж/м}^2$.

2) Скорость расширения вольфрамовой плазмы от поверхности, вдоль силовых линий магнитного поля, равна $V_w = 9$ км/с, что в пересчете на энергию ионов вольфрама составляет $E_w \approx 75$ эВ.

3) Яркость излучения I мишенной плазмы максимальна в диапазоне $z = 0 - 15$ мм и быстро убывает с увеличением расстояния до мишени. При $z = 50 - 60$ мм величина I падает до 20% от своего максимального значения. Несмотря на это, спектральные линии вольфрама удается регистрировать вплоть до $z = 220$ мм.

4) Интенсивность излучения примесей максимальна во время воздействия на мишень «основной» части плазменного потока: $t = 17 - 20$ мкс. Наблюдаемые в эксперименте спектры по форме повторяют друг друга и наилучшим образом описываются суперпозицией спектральных линий двух групп ионов: $W^{+6} - W^{+12}$ и $W^{+15} - W^{+20}$. Для ионов вольфрама со степенями ионизации +13, +14 излучение отсутствует (рис. 2).

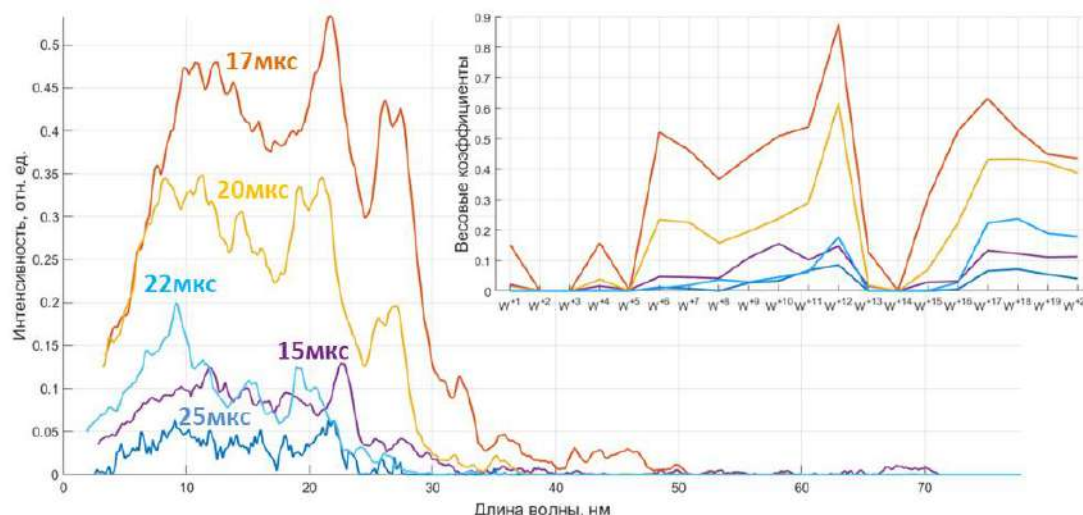


Рис.2. Спектры и ионный состав вольфрамовой плазмы на расстоянии 5 мм до мишени в различные моменты времени

5) С увеличением расстояния до мишени ионный баланс плазмы смещается от низких степеней ионизации ($W^{+6} - W^{+12}$) к более высоким ($W^{+15} - W^{+20}$). Вероятно, это связано с тем, что ионы с высокими энергиями уходят на большие расстояния быстрее, чем ионы с низкими энергиями.

Работа выполнена при поддержке Международной организации ИТЭР (Кадараш, Франция), контракт № IO/18/СТ/4300001763.

Литература

1. Pitts R.A., Bonnin X., Escourbiac F. et al. Physics basis for the first ITER tungsten divertor // Journal of Nuclear Materials. – 2019. – V.20.
2. Федулаев Е.Д. и др. Параметры плазменного потока установки МК-200UG для моделирования быстрых процессов в ИТЭР // Труды 62-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 18-24 ноября 2019 года. Фундаментальная и прикладная физика. — М.: МФТИ, 2019. — 402 с.
3. Новоселова З.И. и др. Исследование эффекта паровой экранировки вольфрама в условиях, характерных для быстрых процессов в ИТЭР // Труды 62-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 18-24 ноября 2019 года. Фундаментальная и прикладная физика. — М.: МФТИ, 2019. — 402 с.
4. Спектральная база данных ADAS. [Электронный ресурс]. URL: <https://open.adas.ac.uk/>.

Спектральные характеристики парового экранирующего слоя в диапазоне 350 – 600 нм при облучении вольфрама интенсивными потоками плазмы

*З.И. Новоселова^{1,2}, И.М. Позняк^{1,2}, Д.А. Топорков², В.М. Сафронов^{1,2,3}, В.Ю. Цыбенко²,
В.А. Костюшин², Д.М. Кочнев², Е.Д. Федулаев^{1,2}, А.И. Румянцева^{1,2}, С.В. Карелов²,
Д.В. Коваленко², А.Д. Ярошевская²*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований

³Проектный центр ИТЭР

Защитные покрытия дивертора и первой стенки ИТЭР могут разрушаться под действием мощных плазменных потоков. Экспериментально доказано, что в условиях, характерных для переходных процессов (срывов, ELM-событий, убегающих электронов и вертикальных перемещений плазменного шнура), эрозии материалов препятствует эффект паровой экранировки. Суть этого эффекта заключается в том, что при воздействии интенсивного потока плазмы вблизи облучаемой поверхности возникает экранирующий слой испаренного вещества мишени, который преобразует энергию налетающего потока в излучение и, тем самым, уменьшает тепловую нагрузку на поверхность [1].

Для построения физических моделей, описывающих эффект паровой экранировки в условиях переходных процессов в ИТЭР, необходимы экспериментальные данные, которые невозможно получить ни на одном из существующих токамаков. Поэтому лабораторные испытания защитных покрытий проводят на электронных и ионных пучках, лазерах, импульсных и квазистационарных плазменных ускорителях.

Цель данной работы – получить экспериментальные данные о спектральных характеристиках излучения экранирующего парового слоя вольфрама в оптическом диапазоне. Эксперименты проводились на установке МК-200UG – рис.1. Вольфрамовые мишени облучались интенсивными потоками водородной плазмы. Параметры облучения указаны на рис.1.



Параметры плазмы	B = 1 Т	B = 2 Т
Энергосодержание потока	25 – 55 кДж	25 – 55 кДж
Продолжительность	7 – 25 мкс	7 – 25 мкс
Диаметр потока	5 см	10 см
Плотность энергии	3 – 7 МДж/м ²	13 – 28 МДж/м ²
Фактор тепл. воздействия	1 – 2.2 ГДж/м ² с ^{0.5}	4 – 8.9 ГДж/м ² с ^{0.5}
Газокинетическое давление	4 атм	14 атм
Направленная энергия ионов	0.2 – 1.6 кэВ	0.2 – 1.6 кэВ
Давления торможения	2 – 5 атм	4 – 9 атм

Рис.1. Общий вид и параметры плазменного потока установки МК-200UG

Спектральные характеристики излучения примешенной плазмы в оптическом диапазоне исследовались с помощью спектрометра CS100M фирмы Thorlabs. Для обработки зарегистрированных спектров был написан комплекс программ, использующих базу данных Национального института стандартов и технологий (Мэриленд, США) [2].

В ходе проделанной работы получены следующие результаты:

1) Пороговая тепловая нагрузка, при которой начинается испарение вольфрама, составляет $q = 1,3 \text{ МДж/м}^2$, о чем свидетельствует появление большого количества спектральных линий атомов и однократно ионизованных ионов вольфрама.

2) Исследование химического состава экранирующей плазмы в присутствии сильного магнитного поля $B = 2 \text{ Тл}$ показало, что вблизи мишени наблюдается интенсивный континуум свечения, а при удалении от неё на $z = 4 \text{ см}$ спектр становится линейчатым. В интервале длин волн 350 – 470 нм помимо спектральных линий водорода и конструкционных материалов мишенной камеры, зарегистрировано большое количество спектральных линий атомов W I и однократно ионизованных ионов вольфрама W II (рис.2). При переходе в область длин волн $\lambda \geq 500 \text{ нм}$ можно наблюдать группы линий, принадлежащие нейтралам W I.

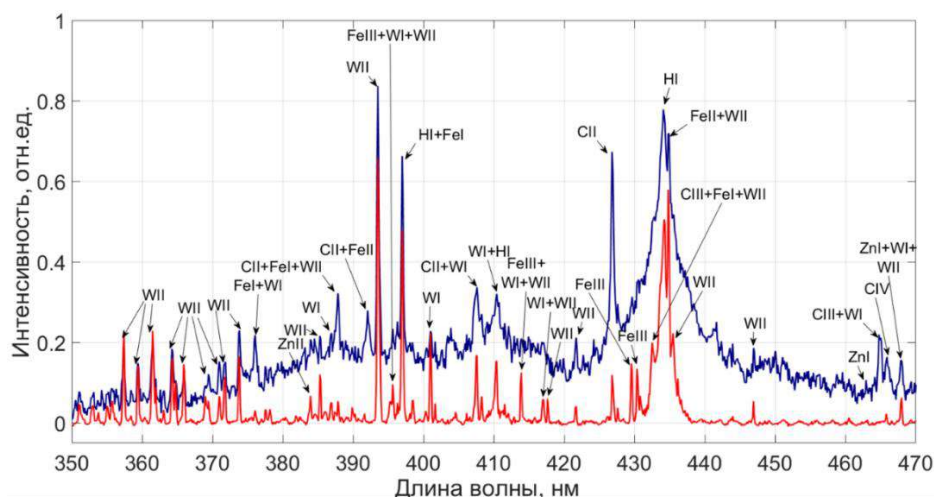


Рис.2. Участок оптического спектра 350 – 470 нм. Синим цветом показан спектр на расстоянии $z = 5$ мм до мишени, красная кривая соответствует $z = 40$ мм

3) Эффективная толщина излучающего плазменного слоя составляет $h_{\text{rad}} \approx 50 - 60$ мм – рис.3, что хорошо согласуется с результатами измерений, выполненными ранее при помощи камеры обскуры и абсолютно калиброванных фотодиодов.

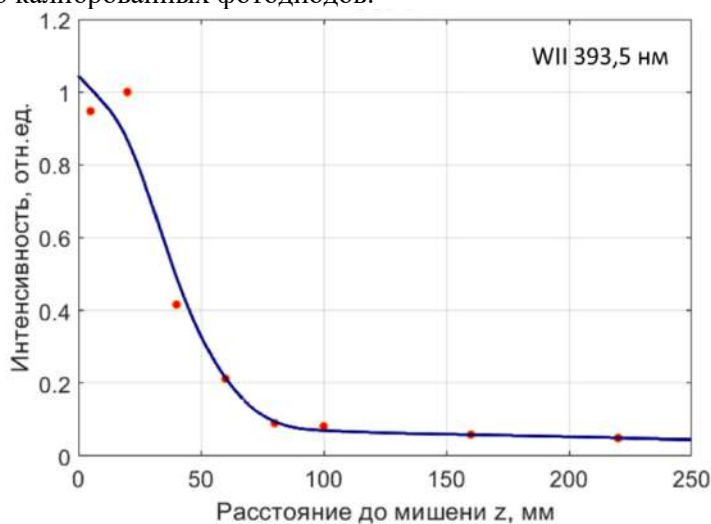


Рис.3. Яркость излучения вольфрамовой плазмы в зависимости от расстояния до мишени

4) Несмотря на то, что яркость излучения вольфрамовой плазмы быстро падает с расстоянием z до мишени, спектральные переходы WI и WII удастся регистрировать вплоть до $z = 220$ мм.

В ходе дальнейшей работы предполагается измерить скорость расширения вольфрамовой плазмы, а также – исследовать изменение ее ионного состава во времени.

Работа выполнена при поддержке Международной организации ИТЭР (Кадараш, Франция), контракт № IO/18/СТ/4300001763.

Литература

1. Pitts R.A., Carpentier S., Escourbiac F. et al. A full tungsten divertor for ITER: Physics issues and design status // Journal of Nuclear Materials. – 2013. – V.438. – P. S48-S56.
2. База данных спектральных линий элементов Национального института стандартов и технологий США. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>.

Цифровой метод разделения сигналов по форме импульса сцинтилляционного детектора LaCl₃ при регистрации нейтронного и гамма-излучения

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

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

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

В данной работе представлен цифровой метод разделения сигналов по форме импульса α -частиц, γ -квантов и нейтронов, регистрируемых сцинтилляционным детектором LaCl₃(Ce). Такое разделение позволяет проводить точные измерения интенсивности различных типов ионизирующего излучения.

Проведено моделирование функций откликов детектора с помощью ПО GEANT4 [1] для LaCl₃(Ce). Исследована корреляция модельных откликов детектора при регистрации быстрых нейтронов и γ -квантов с экспериментальными данными измерений в смешанных полях ионизирующего излучения.

В ходе работы с детектором LaCl₃(Ce) получены следующие результаты: измерен собственный фон кристалла, на основе анализа сигналов собственного фона и источника γ -излучения ²⁴Na подобраны наилучшие параметры разделения, из полного амплитудного спектра выделены амплитудные спектры α -, γ - и нейтронного излучения. На основе разделенных спектров сделаны выводы о качестве разделения, получена характеристика FoM для различных типов ионизирующего излучения в энергетическом диапазоне, соответствующем нейтронам с энергиями $E_n \sim 2,5$ МэВ.

Полученные экспериментальные результаты позволяют говорить о возможности использования детектора LaCl₃(Ce) в качестве спектрометра быстрых DD-нейтронов с использованием метода цифрового разделения сигналов по форме импульса.

Рассмотрена перспектива использования данного детектора на современных установках управляемого термоядерного синтеза.

Работа выполнена в соответствии с государственным контрактом от 21.04.2020 № Н.4а.241.19.20.1042 «Разработка, опытное изготовление, испытание и подготовка к поставке специального оборудования в обеспечение выполнения российских обязательств по проекту ИТЭР в 2020 году».

Литература

1. J. Allison et al., "Recent developments in GEANT4," Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip., vol. 835, pp. 186–225, Nov. 2016.

Экспериментальные исследования ослабления нейтронного потока конструкционными материалами ИТЭР

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

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

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В работе представлены результаты сравнительного анализа экспериментальных данных и моделирования задачи ослабления нейтронного потока конструкционными материалами токамак-реактора ИТЭР. В проекте ИТЭР особую роль играют задачи моделирования процессов активации конструкционных материалов в результате облучения нейтронами. Таким образом, бенчмарк-эксперимент, позволяющий подтвердить соответствие свойств конструкционных материалов заявленным, является крайне важным, так как может послужить источником референтных данных для коррекции модели.

Для целей исследования с помощью ПО MCNP [1] была разработана модель прохождения потока быстрых DD- и DT-нейтронов через набор материалов различной (с шагом 2 см от 2 до 10

см) толщины: полиэтилен, нержавеющая сталь SS316L-IG и бронза марки БрХЦр. Для проверки модели проведена экспериментальная кампания на стенде нейтронной диагностики АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ» по измерению потока и распределения по энергии быстрых DD- и DT-нейтронов при прохождении через исследуемые образцы. На основании сравнительного анализа сделаны выводы о соответствии модели и экспериментальных данных. В работе использованы источники ионизирующего излучения: нейтронный генератор с $E_n \sim 2,5$ МэВ – ИНГ-07Д и нейтронный генератор с $E_n \sim 14$ МэВ – ИНГ-07Т. В качестве мониторов потока и детекторов, измеряющих распределение нейтронов по энергиям, использовались сцинтилляторы на основе кристаллов стиблена, $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$, а также алмазный детектор.

На основании построенной модели и экспериментальных данных была разработана программа дальнейшей кампании бенчмарк-экспериментов с использованием материалов, аналогичных конструкционным материалам токамака-реактора ИТЭР.

Литература

1. *Goorley J. et al.*, Initial MCNP6 Release Overview – MCNP6 version 1.0. – Los Alamos National Lab., United States (2013).

Секция «Фундаментальные взаимодействия и космология»

Председатель: И.А. Пшеничников (д.ф.-м.н.)

Зам. председателя: Э.В. Бугаев (д.ф.-м.н.)

Секретарь: А.И. Шабанов

Дата: 27.11.2020 Время: 10:00

УДК 539.172.17

Анализ фрагментации спектаторов в столкновениях тяжёлых ядер

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

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт ядерных исследований РАН

Научный интерес к столкновениям релятивистских ядер в основном связан с областью их перекрытия — файерболом, где при определённых условиях ядерная материя может переходить в малоизученное горячее и плотное состояние вещества – кварк-глюонную плазму (КГП). Свойствам относительно холодной невзаимодействующей спектаторной материи в экспериментах по столкновениям ядер высоких энергий уделяется меньше внимания, поскольку при этих энергиях даже посредством современных детекторов (калориметров) сложно регистрировать все вылетающие в узкий передний конус спектаторные нуклоны и фрагменты. Например, в эксперименте ALICE на LHC, используются нейтронные и протонные передние калориметры [1], но невозможно регистрировать спектаторные фрагменты. Эксперимент MPD [2] на ускорительном комплексе NICA [3] будет использовать передний калориметр FHCAL [4] для регистрации вылетающих вперёд нуклонов и фрагментов, за исключением предельно малых углов. В связи с этими ограничениями необходима модель, которая предсказывает разнообразные свойства спектаторной материи в целом, для всего диапазона углов и всех типов спектаторов. Такая модель позволит, в частности, связать свойства спектаторной материи с центральностью столкновений, зависящей от прицельного параметра в каждом событии, и исследовать эволюцию этих свойств с изменением начальной энергии столкновений.

Авторами настоящей работы ранее была разработана модель Abrasion-Ablation Monte Carlo for Colliders (AAMCC) [5]. Для вычисления количества удалённых из сталкивающихся ядер нуклонов на стадии abrasion [6] в AAMCC используется модель Gluber Monte Carlo [7], а на следующей стадии ablation – статистические модели испарения и мультифрагментации (SMM) из библиотеки Geant4 [8]. Результаты AAMCC существенно зависят от параметров модели, в частности, от метода вычисления энергии возбуждения спектаторного префрагмента, распадающегося на стадии ablation. Поэтому целью настоящей работы является сравнение результатов AAMCC с экспериментальными данными в широком диапазоне энергий сталкивающихся ядер для проверки достоверности результатов моделирования и корректировки вышеуказанного метода. Выходы спектаторных нуклонов и фрагментов были измерены более двадцати лет назад в столкновениях ядер с фиксированными мишенями [9-13] путем использования ядерной фотографической эмульсии, которая, однако, нечувствительна к нейтронам. В другом эксперименте [14] посредством электронных детекторов (адронных калориметров) регистрировались спектаторные нейтроны и отклоняемые магнитным полем протоны и фрагменты, что позволило различать их заряды.

AAMCC описывает измеренное в эксперименте [14] для различных интервалов прицельного параметра p/ρ отношение для свободных спектаторных нуклонов, а также распределения ряда зарядовых характеристик спектаторов, измеренных в экспериментах [9-13]. Так, например, на Рис. 1 представлены вычисленные с помощью модели AAMCC с параметризацией энергии возбуждения формулой ALADIN корреляции максимального заряда Z_{max} фрагмента в событии, среднего числа

фрагментов с промежуточной массой M_{IMF} ($3 \leq Z \leq 30$), числа фрагментов $N_{Z=n}$ с зарядом $Z = n$ и суммарного заряда фрагментов Z_{bn} (или $Z_{bound} = Z_{b2}$) (т.е. суммы всех атомных чисел Z_i фрагментов с $Z_i \geq n$) в столкновениях ядер ^{197}Au с энергией 10.7 ГэВ на нуклон с ядрами фотоэмульсии (AgBrC) в сравнении с данными коллаборации EMU-01/12 [11]. Вычисленные зависимости в целом находятся в согласии с данными эксперимента, однако модель занижает $N_{Z=2}$ – выходы ядер гелия в центральных событиях. Это может указывать на то, что в таких событиях спектаторная материя специфической формы в виде полумесяца теряет связность, и поэтому до установления термодинамического равновесия и начала статистического распада разделяется на легкие кластеры в результате перколяционных процессов, которые также следует учесть в ААМСС.

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

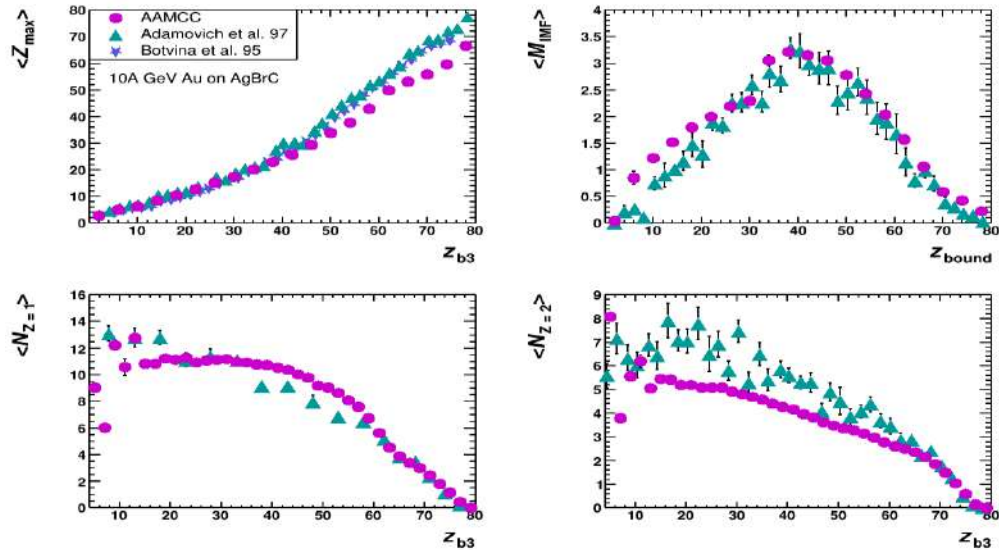


Рис. 1. Сравнение результатов ААМСС с экспериментальными данными коллаборации EMU-01/12 [11] по столкновениям 10.7А ГэВ ^{197}Au с мишенью ядерной фотоэмульсии NIKFI-BR2.

Литература

1. Puddu G. et al. The zero degree calorimeters for the ALICE experiment // Nucl. Instrum. Methods A. 2007. V.581. P. 397-401
2. Abraamyan K. et al. The MPD detector at the NICA heavy-ion collider at JINR // Nucl. Instrum. Methods A. 2011 V.628. P. 99-102
3. Sorin A. et al. Heavy-ion program at NICA/MPD at JINR // Nucl. Phys. A. 2011 V. 855. P. 510-513
4. Ivashkin A. et al. Determination of geometry of heavy ion collisions with forward hadron calorimeter (FHCAL) at MPD/NICA // EPJ Web Conf. V. 2019. 204. 07002
5. Светличный А.О., Пшеничнов И.А. Образование свободных и связанных спектаторных нуклонов в адронных взаимодействиях релятивистских ядер // Изв. РАН. физ. 2020 Т. 84. № 8, с. 1103-1108
6. Hüfner J. et al. Abrasion-ablation in reactions between relativistic heavy ion // Phys. Rev. C. 1975 V. 12. P. 1888
7. Loizides C. et al. Monte Carlo Glauber predictions at present and future nuclear collider // Phys. Rev. C. 2018. V.97. 054910
8. Allison J. et al. Recent developments in Geant4 // Nucl. Instr. and Meth. A. 2016. V. 835. P. 186-225
9. Dabrowska A. et al. Intermittency in ^{197}Au fragmentation // Phys. Rev. C. 1996 V. 53. P. 1532-1540
10. Adamovich M. I. et al. Fragmentation and multifragmentation of 10.6A GeV gold nuclei // Eur. J. Phys. A. 1999. V.5. P. 429-440
11. Adamovich M. I. et al. Multifragmentation of Gold nuclei in the interactions with photoemulsion nuclei at 10.7 GeV/nucleon // Z. Phys. 1997. V. 359. P. 277-290
12. Cherry M. et al. Interactions of 10.6 GeV/nucleon gold nuclei in nuclear emulsion // Z. Phys. 1994. V. 62. P. 25
13. Cherry M. et al. Multiplicities and angular distributions of nucleus-nucleus interactions at SPS energies: Protons to lead // AIP Conf. Proceeding. 1997 V. 412. P. 253-258
14. Appelshäuser H. et al. Spectator nucleons in Pb+Pb collisions at 158A GeV // Eur. J. Phys. A. 1998. V. 2. P. 383-390

Вклад от аннигиляционных диаграмм в редкий распад $B^+ \rightarrow \pi^+ \mu^+ \mu^-$ и его влияние на распределение по инвариантной массе лептонной пары

А.Я. Пархоменко, И.М. Парнова

Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова

Редкие полулептонные распады B -мезонов, идущие за счет нейтральных токов $b \rightarrow s$ и $b \rightarrow d$ с изменением аромата играют большую роль при проверке правильности Стандартной модели, а также при поисках возможной «Новой физики». В работе рассматривается редкий полулептонный распад $B^+ \rightarrow \pi^+ l^+ l^-$, где $l = e, \mu$ – заряженный лептон. Распределение по инвариантной массе мюонной пары и относительная вероятность этого распада выполнены в рамках метода слабых эффективных гамильтонианов с учетом КХД поправок. Такой Гамильтониан для $b \rightarrow s$ и $b \rightarrow d$ кварковых переходов записывается в следующем виде [1]:

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

где G_F – константа Ферми, $p = s, d$ – легкий кварк, задействованный в переходе, $V_{q_1 q_2}$ – элементы матрицы Кабиббо-Кобаяши-Маскавы, $C_i(\mu)$ – коэффициенты Вильсона, определяющие вклад соответствующего оператора $O_i(\mu)$ на масштабе энергий μ .

Матричные элементы для перехода $B \rightarrow P$, где P – псевдоскалярный мезон, в частности, в рассматриваемом процессе $P = \pi^+$, выражаются посредством трех переходных формфакторов $f_+(q^2)$, $f_0(q^2)$ и $f_T(q^2)$, где $q^2 = (p_B - k)^2$ – квадрат импульса, передаваемого лептонной паре [2]:

$$\langle P(k) | \bar{p} \gamma^\mu b | B(p_B) \rangle = f_+(q^2) \left[p_B^\mu + k^\mu - \frac{m_B^2 - m_P^2}{q^2} q^\mu \right] + f_0(q^2) \frac{m_B^2 - m_P^2}{q^2} q^\mu, \quad (2)$$

$$\langle P(k) | \bar{p} \sigma^{\mu\nu} q_\nu b | B(p_B) \rangle = i \left[(p_B^\mu + k^\mu) q^2 - q^\mu (m_B^2 - m_P^2) \right] \frac{f_T(q^2)}{m_B + m_P}, \quad (3)$$

$$\langle P(k) | \bar{p} \gamma^\mu \gamma_5 b | B(p_B) \rangle = 0, \quad \langle P(k) | \bar{p} \sigma^{\mu\nu} \gamma_5 q_\nu | B(p_B) \rangle = 0. \quad (4)$$

Здесь, m_B и m_P – массы B – и псевдоскалярного мезонов соответственно.

Операторы O_7 , O_9 и O_{10} дают вклад в амплитуду процесса $B^+ \rightarrow \pi^+ \mu^+ \mu^-$ в лидирующем порядке. Выражение для дифференциальной вероятности распада легко вычисляется, однако учет КХД поправок, требующих вычисления двухпетлевых диаграмм, приводит к существенным усложнениям. В рассматриваемом приближении вероятность распада можно записать как [3]:

$$\frac{dBr(B \rightarrow P l^+ l^-)}{dq^2} = S_P \frac{2G_F^2 \alpha_{em}^2 \tau_B}{3(4\pi)^5 m_B^3} |V_{tb}^* V_{tp}|^2 \lambda^{\frac{3}{2}}(q^2) F^{BP}(q^2) \sqrt{1 - \frac{4m_l^2}{q^2}}, \quad (5)$$

$$F^{BP}(q^2) = F_{97}^{BP}(q^2) + F_{10}^{BP}(q^2), \quad \lambda(q^2) = (m_B^2 + m_P^2 - q^2)^2 - 4m_B^2 m_P^2, \quad (6)$$

$$F_{97}^{BP}(q^2) = \left(1 + \frac{2m_l^2}{q^2} \right) \left| C_9^{eff}(q^2) f_+^{BP}(q^2) + \frac{2m_b}{m_B + m_P} C_7^{eff}(q^2) f_T^{BP}(q^2) + L_A^{BP}(q^2) \right|^2, \quad (7)$$

$$F_{10}^{BP}(q^2) = \left(1 - \frac{4m_l^2}{q^2} \right) \left| C_{10}^{eff}(q^2) f_+^{BP}(q^2) \right|^2 + \frac{6m_l^2 (m_B^2 - m_P^2)^2}{q^2 \lambda(q^2)} \left| C_{10}^{eff}(q^2) f_0^{BP}(q^2) \right|^2, \quad (8)$$

где S_P – изоспиновый множитель от конечного мезона, в частности, $S_{\pi^\pm} = 1$, $S_{\pi^0} = 1/2$, $C_{7,9,10}^{eff}(q^2)$ – эффективные коэффициенты Вильсона, в которых учитываются КХД поправки, $L_A^{BP}(q^2)$ – вклад от аннигиляционных диаграмм [4].

Анализ распада $B^+ \rightarrow \pi^+ \mu^+ \mu^-$ с учетом аннигиляционных диаграмм проведен для двух типов параметризации формфакторов. Результаты для распределения по инвариантной массе мюонной пары представлены на Рис.1. Здесь, левый график построен с использованием параметризации Бореллея, Каприни и Леллоша (БКЛ) [5], а правый – параметризации Балл и Цвики (БЦ) [6].

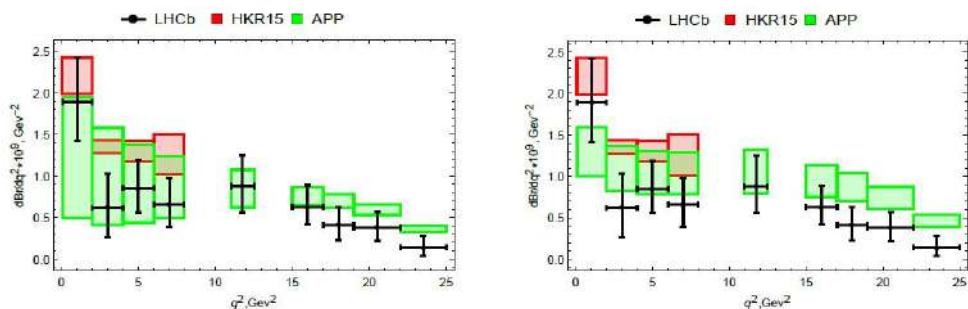


Рис. 1. Дифференциальная вероятность распада $B^+ \rightarrow \pi^+ \mu^+ \mu^-$ в бинах по инвариантной массе мюонной пары с учетом вклада аннигиляционных диаграмм для БКЛ и БЦ параметризаций. Сплошные красные прямоугольники, обозначенные как НКР15, показывают теоретические предсказания, полученные в [8], прямоугольники зеленого цвета, обозначенные как АРР, – предсказания данной работы, крестиками указаны экспериментальные данные коллаборации LHCb [7].

Как можно видеть из Рис. 1, полученные нами предсказания (прямоугольники зеленого цвета, обозначенные как АРР), находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными, полученными коллаборацией LHCb [7] при учете теоретических и экспериментальных погрешностей. Более того, учет вклада аннигиляционных диаграмм дает лучшее согласие с экспериментом в области $0 < q^2 < 2 \text{ ГэВ}^2$. Это позволяет интерпретировать имеющийся экспериментальный выброс в этой области как вклад от аннигиляционных диаграмм. Полученный нами результат дает альтернативное по сравнению с предыдущим анализом объяснение экспериментального значения в области $q^2 \leq 2 \text{ ГэВ}^2$ как вклада больших расстояний от легких векторных ρ , ω и ϕ мезонов [8]. В дальнейшем планируется провести полный совместный анализ данного распада с учетом вкладов аннигиляционных диаграмм и больших расстояний, а также исследовать его зависимость от выбора параметризации переходных формфакторов.

Работа выполнена в рамках совместного проекта, поддержанного РФФИ и ГФЕН (№ 19-52-53041).

Литература

1. Buchalla G., Buras A.J., Lautenbacher M. E. Weak Decays Beyond Leading Logarithms// Rev. Mod. Phys. 1996. V. 68. P. 1125-1144.
2. Beneke M., Feldmann T. Symmetry-breaking corrections to heavy-to-light B meson form factors at large recoil// Nucl. Phys. B. 2001. V. 592. P. 3-34.
3. Ali A., Parkhomenko A.Ya., Rusov A.V. Precise Calculation of the Dilepton Invariant-Mass Spectrum and the Decay Rate in $B^+ \rightarrow \pi^+ l^+ l^-$ in the SM// Phys. Rev. D. 2014. V. 89. P. 094021.
4. Beneke M., Feldmann T., Seidel D. Exclusive radiative and electroweak $b \rightarrow d$ and $b \rightarrow s$ penguin decays at NLO// Eur. Phys. J. C. 2005. V. 41. P. 173-188.
5. Bourrely C., Caprini I., Lellouch L. Model-independent description of $B \rightarrow \pi l \nu$ decays and a determination of $|V_{ub}|$ // Phys. Rev. D. 2009. V. 79. P. 013008.
6. Ball P., Zwicky R. New Results on $B \rightarrow \pi, K, \eta$ Decay Formfactors from Light-Cone Sum Rules// Phys. Rev. D. 2005. V. 71. P. 014015.
7. Aaij R. et al. First measurement of the differential branching fraction and CP asymmetry of the $B^\pm \rightarrow \pi^\pm \mu^+ \mu^-$ decay// JHEP. 2015. V. 10. P. 034.
8. Hambrock C., Khodjamirian A., Rusov A. Hadronic effects and observables in $B^+ \rightarrow \pi^+ l^+ l^-$ decay at large recoil// Phys. Rev. D. 2015. V. 92. P. 074020.

УДК 539.143.5

Влияние поверхностного нейтронного слоя на спектаторную материю в столкновениях релятивистских ядер

Н.А. Козырев^{1,2}, И.А. Пишеничнов^{1,2}, А.О. Светличный^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт ядерных исследований Российской Академии Наук

Как известно, соотношение между плотностью нейтронов и протонов на периферии тяжелых ядер выше, чем в центре, что получило название neutron skin (NS). Изучение NS исключительно важно для оценки энергии симметрии ядер — энергии связи нуклонов в ядерной материи в зависимости от п/р-отношения и для построения уравнения состояния ядерного вещества [1]. Это уравнение определяет свойства ядер на границе линии стабильности [2] и структуру нейтронных звезд [3]. Изучение различия между пространственными распределениями нейтронов и протонов в ядрах, его влияния на электронные оболочки, открывает возможности для проверки стандартной модели [4].

NS изучается в экспериментах по поглощению остановившихся антипротонов ядрами [5], когерентному рождению π^0 на ядрах [6]. Предложено изучать NS в изотопах Na, P, Ca и Ni с увеличенным содержанием нейтронов сталкивая их с мишенью ^{12}C при промежуточных энергиях около

1 ГэВ на нуклон [7,8]. На первый взгляд в столкновениях релятивистских ядер эффекты ядерной структуры уходят на второй план, однако в ряде работ поднимается вопрос и о проявлении NS в столкновениях ядер ^{208}Pb на LHC. Например, в расчетах было показано [9], что NS в ^{208}Pb влияет на соотношение выходов W^+ и W^- бозонов на LHC, сечения рождения которых в pp-, rp- и pp-взаимодействиях различны. В работе [10] для ^{208}Pb – ^{208}Pb взаимодействий на LHC было предсказано влияние NS на инклюзивные выходы фотонов от электромагнитных взаимодействий кварков и глюонов. Однако в работах [9-10] отмечались и трудности проведения соответствующих измерений на LHC для сравнения с теоретическими предсказаниями, поэтому интересно найти другие характеристики взаимодействий ядер ^{208}Pb , более чувствительные к NS, которые могли бы быть измерены на LHC и других ускорителях.

В настоящей работе предлагается изучать зависимость выходов спектаторных нуклонов в центральных столкновениях ^{208}Pb – ^{208}Pb на LHC от толщины NS. Спектаторная материя по определению включает в себя те нуклоны, которые не взаимодействуют с нуклонами ядра-партнера по столкновению. Она представлена как свободными нуклонами, так и ядерными фрагментами, которые в эксперименте обычно регистрируются с помощью передних адронных калориметров. Например, в эксперименте NA49 [11] на CERN SPS регистрировались спектаторные нейтроны, протоны и фрагменты, а в современном эксперименте ALICE [12] на LHC регистрируются спектаторные нейтроны и протоны. В настоящей работе количества спектаторных нейтронов и протонов в каждом столкновении ядер вычисляются посредством ранее разработанной авторами модели Abrasion - Ablation Monte Carlo for Colliders (AAMCC). AAMCC использует известную модель Glauber MC [13] для определения количества взаимодействующих нуклонов и нуклонов-спектаторов в каждом из сталкивающихся ядер. Затем спектаторная материя от каждого из ядер рассматривается в качестве возбужденных префрагментов, распады которых разыгрываются посредством моделей испарения, Fermi break-up и статистической модели мультифрагментации SMM [14] из библиотеки Geant4 [15].

С помощью AAMCC нами были вычислены выходы спектаторных нейтронов и протонов в центральных ^{208}Pb – ^{208}Pb столкновениях на CERN SPS и на LHC, с учетом и без учета NS (Рис.1 и 2). Благодаря использованию различных параметризаций энергии возбуждения была показана чувствительность результатов к их выбору. Однако заметная разница в вычисленных сечениях каналов с вылетом определённого количества спектаторных нейтронов и протонов, которая возникает при введении в расчет NS, возникает при использовании любой параметризации. При включении в расчет NS среднее число спектаторных нейтронов растет на 30%, а среднее число протонов в составе спектаторов падает. Это объясняется тем, что в центральных событиях с почти полным перекрытием сталкивающихся ядер спектаторные нуклоны происходят исключительно из периферии ядер, где разница между плотностями нейтронов и протонов в случае расчетов с NS особенно велика. Эффект NS ещё более заметен в беспротонных событиях (Рис.2), где сечения событий с 1–12 спектаторными нейтронами могут увеличиваться в два и более раз при учёте NS. Увеличение ширины NS в моделировании приводит к усилению эффекта, что делает потенциально возможным измерение толщины NS ядер на ускорителях релятивистских ядер. В заключение можно отметить, что в центральных столкновениях релятивистских ядер ^{208}Pb их далекая ядерная периферия может быть «срезана» в виде спектаторных нуклонов и изучена в передних калориметрах на предмет n/p-отношения.

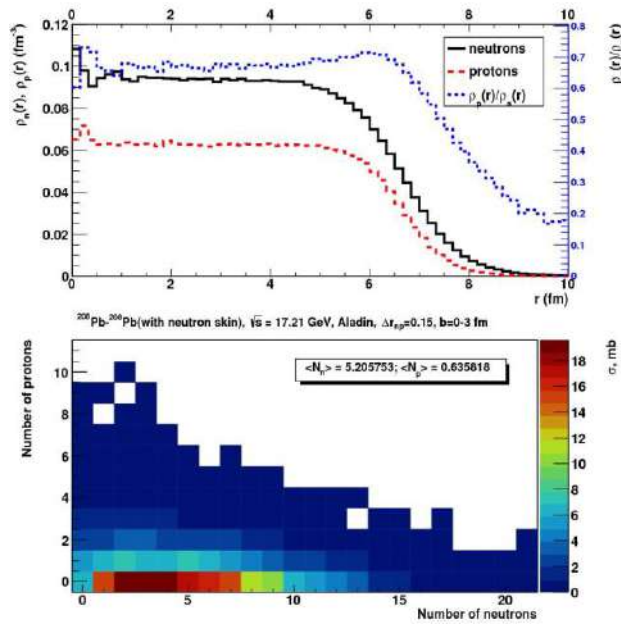


Рис.1 Радиальные распределения плотностей нейтронов и протонов (сверху), сечения выходов спектаторных нуклонов (снизу)

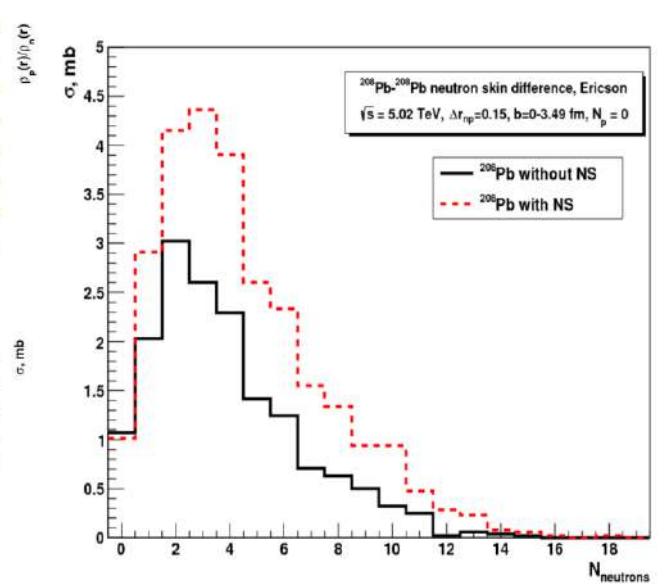


Рис.2 Сечения беспротонных событий с определенным числом нейтронов, вычисленные с учетом и без учета neutron skin

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

Литература

1. Alex Brown B. Neutron Radii in Nuclei and the Neutron Equation of State. // Phys. Rev. Lett. 2000. V.85. P.5296.
2. Dobaczewski J., Nazarewicz W., Werner T.R. Neutron radii and skins in the Hartree-Fock-Bogoliubov calculations // Z. Phys. A. 1996. Vol. 354. no. 1. Pp. 27–35.
3. Horowitz C.J., Piekarewicz J. Neutron star structure and the neutron radius of ^{208}Pb // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 86. no. 25. P. 5647.
4. Pollock S.J., Welliver M.C. Effects of neutron spatial distributions on atomic parity nonconservation in cesium // Phys. Lett. B. 1999. Vol. 464. no. 3-4. Pp. 177–182
5. Trzcińska A. et al. Neutron density distributions deduced from antiprotonic atoms // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. P. 82501.
6. Tarbert C.M. et al. Neutron skin of ^{208}Pb from Coherent Pion Photoproduction // Phys. Rev. Lett. 2014. V.112. P.242502.
7. Fang D.Q. et al. Neutron removal cross section as a measure of neutron skin // Phys. Rev. C. 2010. V.81. P.047603.
8. Fang D.Q. et al. Effects of neutron skin thickness in peripheral nuclear reactions // Chin. Phys. Lett. 2011. V. 28. P. 10.
9. M. Alvioli, M. Strikman. Spin-isospin correlated configurations in complex nuclei and neutron skin effect in $W^\pm$ production in high-energy proton-lead collisions // Phys. Rev. C. 2019. Vol. 100. no. 2. P. 024912.
10. Somnath De. The effect of neutron skin on inclusive prompt photon production in Pb + Pb collisions at Large Hadron Collider energies // J. Phys. G. 2017. V. 44. P. 045104
11. H. Appelshäuser et al. Spectator nucleons in Pb+Pb collisions at 158 A·GeV // Eur. Phys. J. A. 1998. V. 2. P. 383-390
12. B. Abelev et al. Centrality determination of Pb-Pb collisions at $\sqrt{s_{\text{NN}}} = 2.76$ TeV with ALICE // Phys. Rev. C. 2013. V. 88. P. 044909
13. C. Loizides et al. Improved Monte Carlo Glauber predictions at present and future nuclear colliders // Phys. Rev. C. 2018. V.97. P. 054910
14. J. Bondorf et al. Statistical multifragmentation of nuclei // Phys. Rep. 1995. V. 257. P. 133-221
15. Allison J. et al. GEANT4—a simulation toolkit // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A. 2016. V.835. P.186.

Восстановление сигнала B_c мезона в распаде $B_c^+ \rightarrow J/\psi D_s^+$ на данных эксперимента CMS

Н.К. Петров

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

B_c^+ мезон представляет собой очень интересный объект для изучения, так как он распадается через слабое взаимодействие и содержит сразу 2 тяжелых кварка – очарованный и прелестный. Данный мезон впервые был обнаружен коллаборацией CDF в полупертоновом канале распада [1], однако полностью адронных распадов известно всего несколько. Распад $B_c^+ \rightarrow J/\psi D_s^+$ был впервые обнаружен в эксперименте LHCb в 2013 году [2]. Однако в эксперименте CMS [3] восстановление данного канала еще не было изучено.

В настоящей работе представлены результаты по получению сигнала B_c^+ через восстановление следующего канала распада: $B_c^+ \rightarrow J/\psi D_s^+, J/\psi \rightarrow \mu^+ \mu^-, D_s^+ \rightarrow \phi \pi^+, \phi \rightarrow K^+ K^-$. Для восстановления были использованы данные полученные в эксперименте CMS в течение Run II при столкновении протонов с энергией 13 ТэВ в системе центра инерции.

При восстановлении кандидатов сначала ищутся два мюона с противоположными зарядами, треки которых фитируются в общую вершину для получения $J/\psi \rightarrow \mu^+ \mu^-$. После чего ищутся три трека, двум из которых приписывается каоновые гипотезы, а третьему массовая гипотеза пиона. Инвариантная масса двух каонов должна быть близка к общеизвестной массе ϕ [4], а инвариантная масса всех трех треков, в свою очередь, к массе D_s^+ . После чего три трека фитируются в общую вершину. Финальной частью реконструкции является кинематический фит двух противоположно-заряженных мюонов и псевдо-трека D_s^+ в одну вершину, при этом масса двух мюонов должна совпадать с общеизвестной массой J/ψ .

В течении офлайн отбора применяются кинематические и топологические условия отбора для подавления различного рода фонов. Наиболее эффективными являются ограничения на поперечные импульсы, значимости отлета частиц и углы между направлениями вылета и импульса.

Для выделения сигнальной и фоновой компонент используется аппроксимация с помощью программного обеспечения ROOT и пакета RooFit [5], причем сигнал описан функцией Гаусса, а фон — с помощью полиномов.

Таким образом, впервые в эксперименте CMS был успешно восстановлен распад $B_c^+ \rightarrow J/\psi D_s^+$. Настоящий результат представляет отличную способность CMS восстанавливать тяжелые и дважды тяжелые адроны и открывает возможности для дальнейшего изучения спектроскопии B_c^+ мезонов, включая поиск новых состояний и распадов с участием этой прелестно-очарованной частицы

Литература

1. CDF Collaboration, *F. Abe*. Observation of the B_c^+ meson in $p\bar{p}$ collisions at $\sqrt{s} = 1.8$ TeV, Phys. Rev. Lett. Vol. 81 P.2432
2. LHCb Collaboration, *R. Aaij*, Observation of $B_c^+ \rightarrow J/\psi D_s^+$ and $B_c^+ \rightarrow J/\psi D_s^{*+}$ decays, Phys. Rev. D Vol.87 P. 1120012
3. CMS Collaboration, *Chatrchyan S. [et al.]*. The CMS experiment at the CERN LHC // JINST. 2008. Vol. 3. P. S08004.
4. Particle Data Group, *Tabanashi M. [et al.]*. Review of Particle Properties // Phys. Rev. D. 2018. V. 98. P. 030001.
5. *Verkerke W., Kirkby D. P.* The RooFit toolkit for data modeling // eConf C. 2003. Vol. 0303241. P. MOLT007.

Измерение и настройка временных параметров кремниевых детекторов, используемых при определении энергии нейтронов по времени пролета на ускорителе У-120 НИИЯФ МГУ

Е.С. Конобеевский^{1,2}, М.В. Мордовской^{1,2}, С.В. Зуев², А.А. Каспаров², А.А. Афонин², В.В. Мицук^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт ядерных исследований РАН

Цель данной работы состояла в том, чтобы найти доступный способ предварительного отбора кремниевых детекторов с удовлетворительными характеристиками временного разрешения, пригодными для получения стартового импульса во времяпролетном канале установки, определить для них оптимальные напряжения смещения. Не менее важная цель работы – проверить возможность калибровки временного канала без использования ускорительного времени.

При изучении реакций на легких ядрах на ускорителе НИИЯФ используется двухплечевой спектрометр [1]. Он состоит из телескопа ΔE - E кремниевых поверхностно-барьерных детекторов (Si-детекторов) заряженных частиц и сцинтилляционных детекторов в другом плече. Телескоп определяет энергию и тип заряженных частиц, сцинтилляционные детекторы определяют энергию нейтронов по времени пролета и позволяют отделить нейтронные события от гамма-излучения по форме импульса. В [1] описан метод временной калибровки и измерения временного разрешения детекторов с помощью ускорителя.

В случае замены кремниевых детекторов требуется настройка и измерение временного разрешения детекторов, а также и повторное - временной калибровки тракта установки. Это требует значительного ускорительного времени.

В нашей работе для временной калибровки и измерения временного разрешения использовался стандартный α-источник ОСГИ Ra-226. Регистрировались одновременно испускаемые альфа-и гамма-лучи от распадов. Измерения проводились на том же оборудовании, что и в экспериментах [1]. Альфа-частицы регистрировались Si-детектором, гамма-кванты регистрировались сцинтилляционными детекторами с предварительно измеренными характеристиками. Измерения проводились на большом количестве детекторов площадью от 20 до 100 мм² и толщиной рабочего слоя от 23 до 500 мкм. В измерениях использовались предусилители CANBERRA 2003BT и ORTEC142. Исследовались зависимости от напряжения смещения таких параметров, как: амплитудное и временное разрешение, отношение «сигнал / шум» в быстром и медленном каналах, длительность и форма фронта сигнала и температура поверхности для каждого детектора.

В результате измерений получены рекомендации по выбору рабочей точки в напряжении смещения для достижения наилучшего временного и амплитудного разрешений, а также отработана методика калибровки временного канала установки в лабораторных условиях.

Настоящее исследование финансировалось РФФИ по исследовательскому проекту № 18-32-00944.

Литература

1. Zuyev S.V., Kasparov A.A., Konobeevski E.S., Mordovskoy M.V., Lebedev V.M., Spassky A.V. Reaction $d + {}^2\text{H} \rightarrow {}^3\text{He} + n$ as a source of quasi-monoenergetic neutrons for studying the properties of neutron detectors. // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2016. Т. 80. № 3. С. 232-236.

УДК 539.123

Изучение стерильных нейтрино в реакторных экспериментах

В.С. Завадский

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

Стерильные нейтрино — один из способов объяснить возникающую аномалию в реакторных экспериментах [1] (дефицит нейтрино). Для изучения области возможных параметров стерильной осцилляции используется множество установок: PROSPECT, Daya Bay, Bugey-3, Neutrino-4, DANSS и т.д. Иногда ограничения на параметры стерильных осцилляций разных экспериментов противоречат друг другу.

Данная работа посвящена изучению возможных значений стерильных параметров для смешивания стерильного и электронного нейтрино на основе модели реакторного эксперимента. В качестве наблюдаемой используется полный поток антинейтрино от атомного реактора (в качестве топлива используется четыре изотопа: ²³⁵U, ²³⁸U, ²³⁹Pu, ²⁴¹Pu). Изучена зависимость контуров исключения возможных параметров от включаемых в анализ эффектов. Для построения самих контуров используется метод CLs [2] в двух возможных реализациях: гауссово приближение и Монте-Карло моделирования. Оба варианта дают приемлемый результат в области возможных погрешностей.

Литература

1. *M. Dentler et al.* The reactor neutrino anomaly: status and recent developments // *Moriond EW*. 2018 P. 273-278
2. *Qian X., Tan A., Ling J. J., Nakajima Y., Zhang C.* The Gaussian CLs Method for Searches of New Physics // *NIMA*. 2016. V. 827. P. 63-78

УДК 539.123

Моделирование концентраторов черенковского света для детектора Гипер-Камиоканде с целью увеличения чувствительности к нейтрино низких энергий

А.А. Шайкина

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

Гипер-Камиоканде [1] – это водный черенковский детектор третьего поколения, который будет построен в Японии. Основные цели эксперимента включают поиск распада протона, изучение солнечных, атмосферных и астрофизических нейтрино, а также чувствительный поиск и измерение величины нарушения СР-симметрии в лептонном секторе, которое могло бы объяснить барионную асимметрию во Вселенной.

Для увеличения эффективности регистрации черенковских фотонов при низких энергиях было предложено использовать концентраторы света (LC), представляющие собой зеркальные поверхности, окружающие фотоэлектронные умножители (ФЭУ) (рис.1). Подобные концентраторы применялись в экспериментах SNO [2] и Borexino [3]. Они позволяют повысить точность восстановления вершины взаимодействия и снизить энергетический порог.

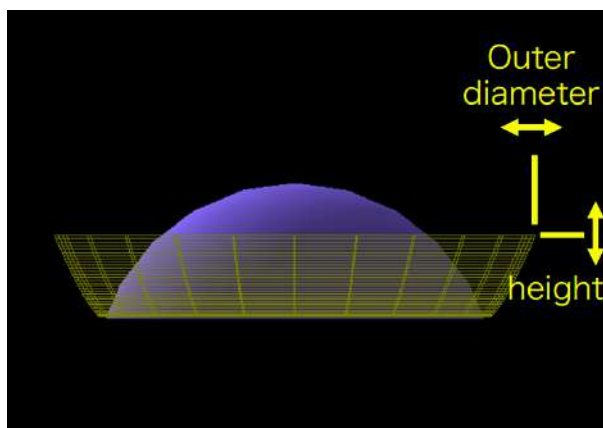


Рис.1. Схема предлагаемого концентратора света (жёлтый цвет), окружающего ФЭУ (синий цвет).

В настоящий момент работа над LC ведётся в следующих направлениях: изучение негативных физических эффектов, отбор материалов и оптимизация формы и размеров LC. Данная работа посвящена последнему пункту. Целью исследования является разработка метода оптимизации формы и размеров LC с учётом трёх основных эффектов: увеличение выхода фотоэлектронов с ФЭУ, уменьшение отражения от зеркала мимо ФЭУ и затенение ФЭУ зеркалом.

Проведено компьютерное моделирование, включающее два этапа: моделирование единичного LC с помощью пакета ROBAST и моделирование всего детектора Гипер-Камиоканде с помощью WCSim. На ФЭУ, окруженный зеркалом, представляющим собой усечённый конус высотой 114мм и внутренним радиусом 255.2мм, под разными углами направлялись световые лучи, параллельные друг другу.

Рис. 2 показывает число фотонов, попавших на ФЭУ, без LC и для LC с 4 различными внешними радиусами. Можно отметить значительное увеличение числа фотонов для углов, меньших угла раствора конуса. Для больших углов начинает действовать эффект затенения конуса.

На следующих графиках (рис.3 и рис.4) учитывается эффект отражения света мимо ФЭУ. Они показывают отношение числа фотонов, улетевших мимо ФЭУ, к числу фотонов, попавших на ФЭУ, для различных значений внешнего радиуса (рис.2) и высоты конуса (рис.3).

Согласно результатам моделирования, представленным выше, эффекты от LC в значительной степени зависят от угла, под которым фотоны падают на ФЭУ. Таким образом, необходимо

моделирование всего детектора Гипер-Камиоканде, что позволит определить преимущественные углы падения света на ФЭУ и оптимизировать параметры LC. Данная работа ведётся в настоящее время.

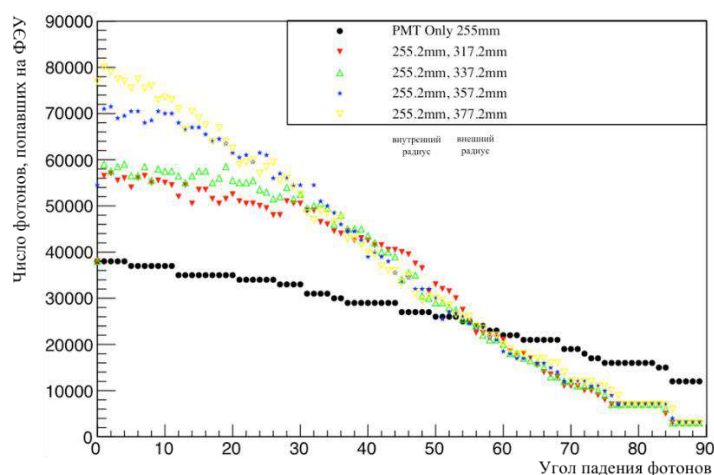


Рис.2. Число фотонов, попавших на ФЭУ без LC и при различных конфигурациях LC.

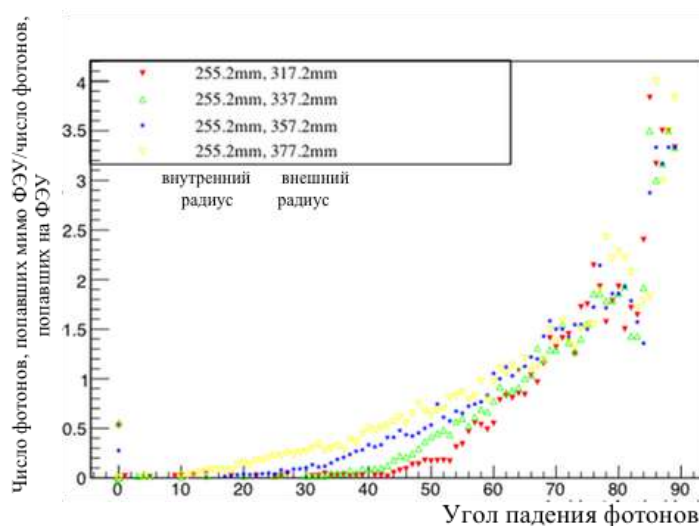


Рис.3. Отношение числа фотонов, попавших мимо ФЭУ, к числу фотонов, попавших на ФЭУ при различных значениях внешнего радиуса конуса LC.

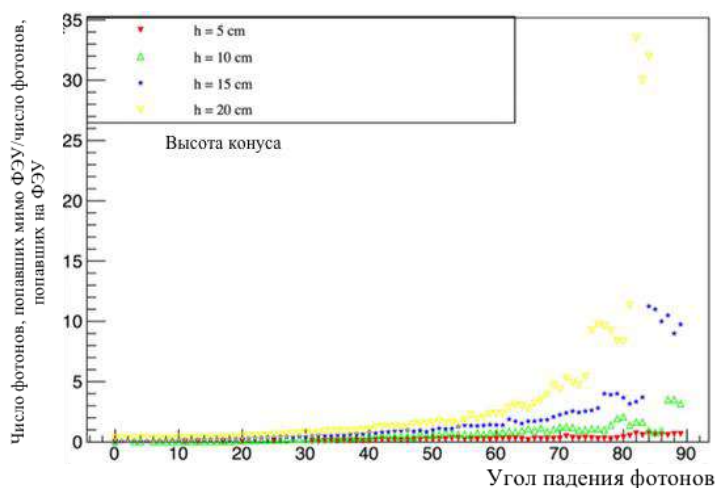


Рис.4. Отношение числа фотонов, попавших мимо ФЭУ, к числу фотонов, попавших на ФЭУ при различных значениях высоты конуса LC.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-52-50010 и гранта РНФ № 19-12-00325.

Литература.

1. Abe K. *et al.* Hyper-Kamiokande design report //arXiv:1805.04163. – 2018.
2. McDonald A. B. *et al.* The sudbury neutrino observatory project //Nuclear Physics B, Proceedings Supplements. – 1999. – Т. 77. – №. 1-3. – С. 43-47.
3. Prochaska J. X. The design and fabrication of optimal light collectors for the CTF upgrade //Senior Thesis, Princeton University. – 1993.

УДК 52-17

Моделирование сигнала от реликтовой темной материи (WIMP) и фоновых нейтрино для эксперимента NEWSdm

И.Д. Видулин¹, А.М. Анохина^{1,2}

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

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

К настоящему времени имеются убедительные доказательства существования во Вселенной тёмной материи. Однако для её детектирования необходимо расширение чувствительности экспериментов за пределами нейтринного фона. Направленные эксперименты по поиску темной материи призваны выявить присутствие WIMПов (Weakly Interacting Massive Particle - слабовазаимодействующая массивная частица) - кандидатов на роль частиц тёмной материи.

Эксперимент NEWSdm [1] (Nuclear Emulsions for WIMP Search - directional measurement: ядерные эмульсии для поиска WIMПов - направленные измерения) выгодно отличается от других высокой чувствительностью эмульсий и направленной схемой эксперимента. Предполагается, что WIMПы способны упруго взаимодействовать с ядрами водорода и группы CNO с образованием коротких треков ядер отдачи (H, C, N, O входят в состав ядерных эмульсий). С помощью микроскопа данные треки изучаются в виде проявленных кристаллов AgBr эмульсии.

Ожидается, что относительно Земли поток WIMПов направлен от созвездия Лебедь с Максвелловским распределением по скоростям (средняя скорость 220 км/с, $\sigma=156$ км/с) [2]. Планируется зафиксировать избыток событий от Лебеда, так как детектор в течение всего эксперимента будет одинаково ориентирован по отношению к данному направлению.

В настоящей работе проведено моделирование упругого взаимодействия WIMПов с веществом эмульсии с образованием ядер отдачи по дважды дифференциальному спектру, по энергии и углу вылета (рис. 1). С помощью GEANT4 [3] (StandardNR Physics List) были получены треки ядер отдачи. Построены распределения длин треков и угловые распределения.

На основании полученных распределений стало ясно, что в эксперименте придётся иметь дело с достаточно широким распределением по углу, не зависящим от энергии ядер отдачи.

При этом направления треков не зависят от их длины (рис. 2).

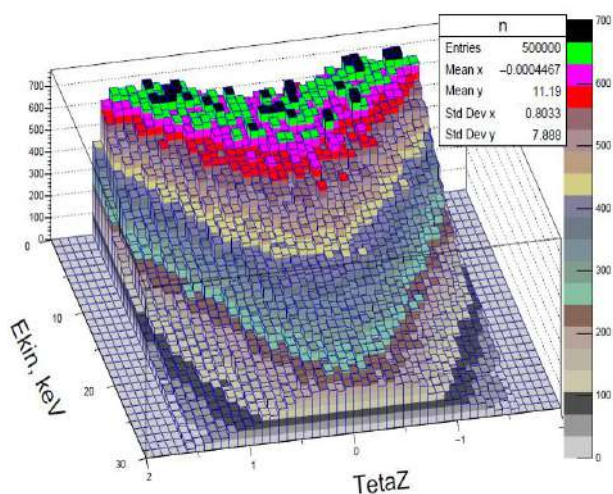


Рис.1. Распределение ядер отдачи по энергии и углу между направлением ядра отдачи и налетающим WIMПом в проекции на плоскость эмульсии.

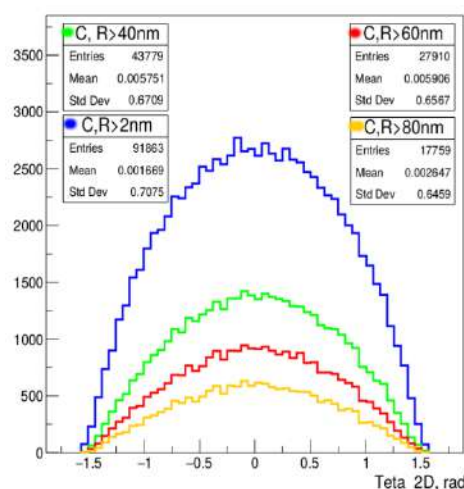


Рис.2. Зависимость углового распределения треков ядер отдачи углерода от их длины. Энергия налетающих WIMПов 60 ГэВ.

В эксперименте NEWSdm одним из компонентов фона являются треки ядер отдачи от упругого взаимодействия нейтрино. Используемый спектр нейтрино [4] представлен на рис. 3. Был рассмотрен фон от изотропных нейтрино (атмосферных и нейтрино DSNB от сверхновых). Моделирование показало, что треки ядер отдачи от изотропных нейтрино будут значительно длиннее треков ядер отдачи от WIMПов, что позволит частично отбросить данную компоненту фона.

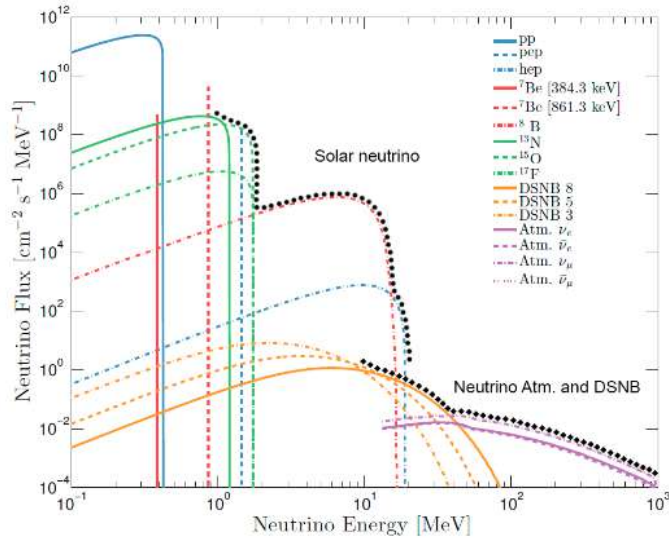


Рис. 3. Зависимость различных компонент нейтринного потока от энергии. Отмечены рассматриваемые компоненты: солнечные от 1 МэВ и изотропные от 10 МэВ.

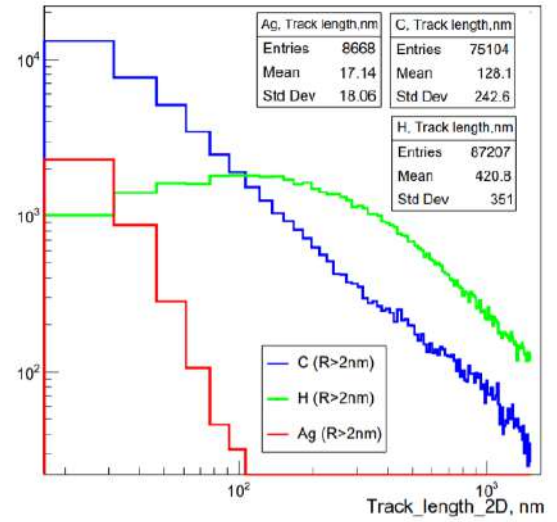


Рис. 4. Распределение треков ядер отдачи H, C, Ag от изотропных нейтрино с энергиями > 10 МэВ

Отдельно рассмотрен анизотропный фон солнечных нейтрино в течение года в сравнении с сигналом от WIMПов в проекции Моллвейде (рис. 3).

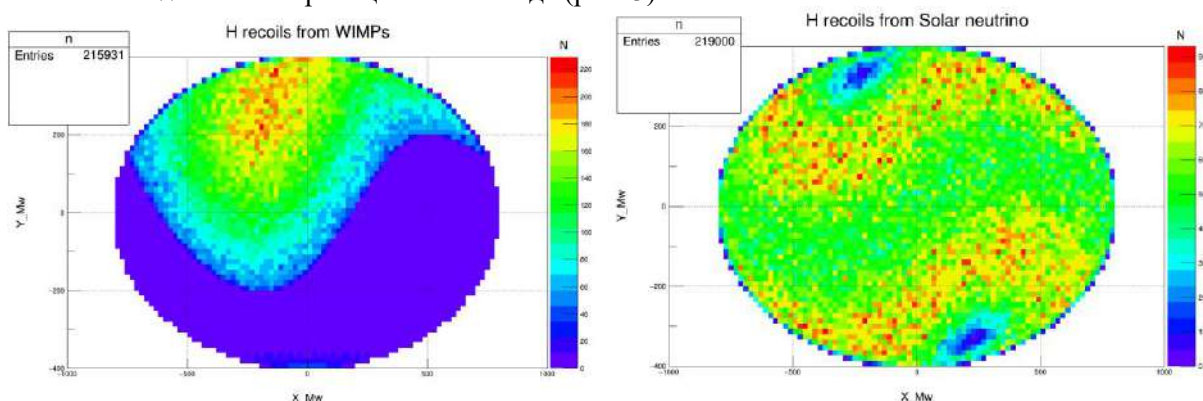


Рис. 5. Распределение ядер отдачи водорода от взаимодействия с WIMПами (слева) и солнечными нейтрино при годовой экспозиции (справа) в условных единицах.

Как можно видеть, сигналы обладают различной анизотропией, что предоставляет возможность отличить их друг от друга.

Литература

1. De Lellis G. Directional dark matter search with the NEWSdm experiment // EPJ Web Conf. / ed. De Vincenzi M., Capone A., Morselli A. 2019. V. 209. P. 1–5.
2. Alenazi M.S., Gondolo P. Directional recoil rates for WIMP direct detection // Phys. Rev. D. 2008. V. 77, № 4. P. 1–39.
3. Geant4 Collaboration. Book for Application Developers. 2017.
4. O'Hare [et al]. Readout strategies for directional dark matter detection beyond the neutrino background // Phys. Rev. D. 2015. V. 92, № 6. P. 3.

УДК 539.1.05

Моделирование триггера отбора событий с использованием калориметра FHCaI установки MPD/NICA

С.А. Мусин

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

В установке MPD/NICA набор экспериментальных данных будет осуществляться согласно триггеру по центральности ядро-ядерных столкновений. Триггер, включающий сигнал калориметра, отбирает только события с энергией больше некоторого заданного порогового значения. При выборе оптимального значения пороговой энергии регистрации событий необходимо найти компромисс для того, чтобы отсеять большую часть шумов на низких энергиях, при этом не потеряв значимое число низкоэнергетических событий. Для моделирования столкновения в программной среде `mpdroot` модули калориметра FHCaI были сгруппированы в 3 кольца: внутреннее, среднее и внешнее в соответствии с рис. 1 [1].

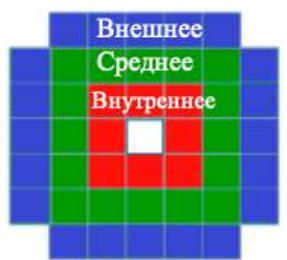


Рис.1. Модули калориметра, использованные в триггере с использованием FHCaI

Поскольку конус частиц, образовавшихся в результате периферического столкновения гораздо более узкий, чем конус центрального столкновения, было выдвинуто предположение, что основную информацию о периферических событиях несет внутреннее кольцо модулей, наиболее приближенное к каналу движения частиц. Для сравнения были промоделированы случаи различных комбинаций использованных в триггере колец: только внутреннее кольцо, внутреннее и среднее, все модули плеча калориметра. В этих комбинациях задействовано разное количество модулей, а следовательно они подвержены различному шумовому воздействию, представляющему собой сумму сигналов от использованных модулей. В связи с этим, необходимая пороговая энергия регистрации рассчитывается на один модуль, а итоговая энергия сборки рассчитывается путем суммирования по количеству модулей. Зависимости эффективности регистрации частиц от пороговой энергии представлены на рис. 2.

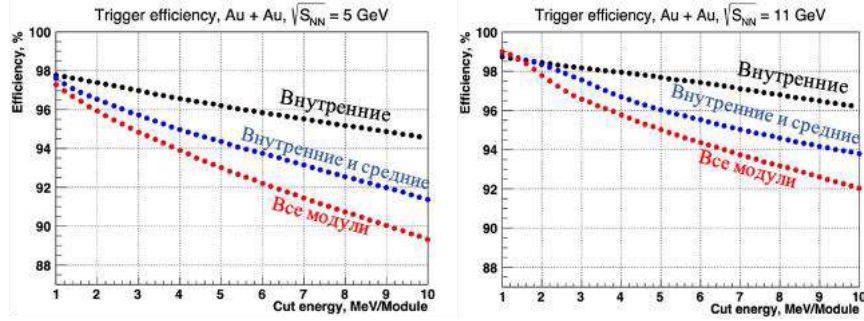


Рис.2. Зависимость эффективности регистрации от пороговой энергии триггера для разных конфигураций использованных модулей. Слева для энергии столкновения 5 ГэВ, справа – 11 ГэВ на модуль.

Из полученных зависимостей видно, что наиболее эффективным является использование только внутренней области калориметра, и во всей области рассмотренных пороговых энергий эффективность регистрации с ростом энергии спадает плавно и монотонно, следовательно, выбор пороговой энергии может обуславливаться только отсечением шумов от конечного сигнала. Основные шумы, действующие на калориметр, имеют энергию ниже 5 МэВ. [2] Эти шумы включают в себя темновой ток фотодетектора, а также помехи, наводимые на электронные составляющие модуля. Для пороговой энергии регистрации 5 МэВ/модуль была построена зависимость дифференциальной эффективности регистрации от прицельного параметра для энергий коллайдера NICA 5 ГэВ и 11 ГэВ (см. рис. 3) в сравнении с эффективностью триггера с использованием быстрого переднего детектора FFD. [3]

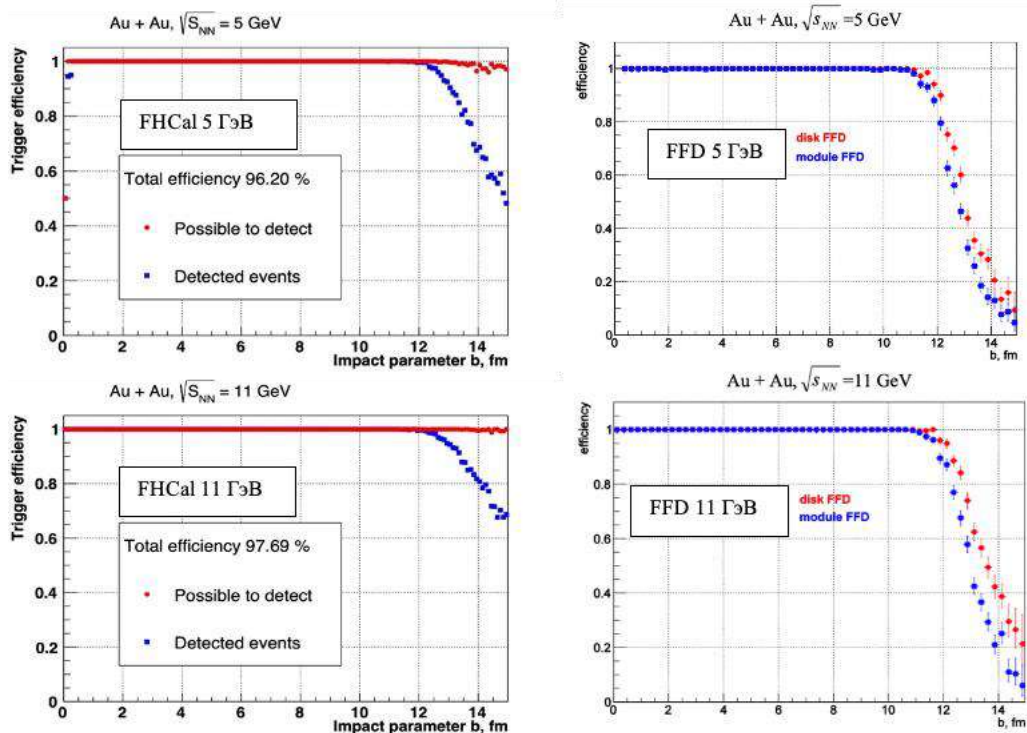


Рис.3. Зависимость эффективности регистрации от прицельного параметра. Сверху для энергии столкновения 5 ГэВ, снизу – 11 ГэВ. Графики справа получены для триггера с использованием FFD [3], слева – с использованием FHCAL. Синим отмечена эффективность триггера с выбранной пороговой энергией ($E_{cut} = 5$ МэВ/модуль для FHCAL).

Использование триггера с сигналом от калориметра FHCAL демонстрирует максимальную эффективность для больших значений центральности. Эффективность падает при увеличении прицельного параметра, что связано с наличием центрального отверстия в калориметре для прохождения ионпровода ускорителя. В результате, тяжелые фрагменты улетают в это отверстие и не детектируются калориметром. Как видно, эффективность данного метода намного выше эффективности триггера с использованием FFD, что позволяет точнее использовать данные с детектора MPD, включая задачи по определению геометрии столкновения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 18-02-40065 мега.

Литература

1. MPD. Fast Forward Detector. Technical Design Report. – 2019. – URL: <http://mpd.jinr.ru/wp-content/uploads/2019/09/FFD-TDR-Aug-2019.pdf> (дата обращения: 02.06.2020).
2. A. Ivashkin et al., Journal of Instrumentation, v. 15 (2020) C06044
3. MPD. Fast Forward Detector. Technical Design Report. – 2019. – URL: <http://mpd.jinr.ru/wp-content/uploads/2019/09/FFD-TDR-Aug-2019.pdf> (дата обращения: 02.06.2020).

УДК 539.1.07

Образование состояний чармония χ_{cJ} ($J = 0, 1, 2$) в столкновениях протонов и тяжелых ионов на БАК

А.М. Варламов¹, Ю.В. Харлов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²НИЦ “Курчатовский Институт” - ИФВЭ

Исследование образования мезонов, состоящих из пар тяжелых кварков и антикварков (кваркониум), в столкновениях протонов и тяжелых ионов при высоких энергиях является чувствительным инструментом для изучения динамики сильных взаимодействий [1]. В кварк-глюонной среде в состоянии деконфайнмента, образующейся в столкновениях тяжелых ионов, модификация спектров рождения кваркonia определяется различными эффектами: цветное экранирование s -кварков приводит к подавлению образования связанных состояний $c\bar{c}$, с другой стороны, подавление выходов чармония может быть вызвано его диссоциацией из-за вторичного взаимодействия образовавшегося мезона с кварк-глюонной средой. Второй эффект зависит от энергии связи $c\bar{c}$ пары и от квантовых чисел чармония, и, следовательно, систематическое измерение сечений образования различных состояний чармония в столкновениях тяжелых ионов и сравнение с сечениями образования в столкновениях протонов может количественно определить вклад механизма диссоциации в модификацию спектров чармония. Выполнение этой задачи требует измерений различных состояний чармония: от самых легких, таких как J/ψ до более тяжелых, таких как χ_{cJ} ($J = 0, 1, 2$) характеризующимися низкой энергией связи $c\bar{c}$ и малым расщеплением по массе [2]. Состояния χ_{cJ} являются также доминирующим источником J/ψ поэтому измерения сечений образования χ_{cJ} важно для разделения сечений образования так называемых прямых J/ψ т.е. тех, которые образуются непосредственно в столкновениях пучков от вторичных J/ψ , образующихся от распадов более тяжелых частиц.

В данной работе исследуется возможность измерения спектров рождения χ_{cJ} в эксперименте ALICE на Большом Адронном Коллайдере [3]. Реконструкция χ_{cJ} проводится в режиме распада $\chi_{cJ} \rightarrow J/\psi \gamma \rightarrow e^+ e^- \gamma$, для регистрации частиц конечного состояния которой используются электромагнитные калориметры EMCAL и PHOS, а также центральная трековая система, состоящая из детекторов TPC (Time Projection Chamber) и ITS (Inner Tracking System) [3]. Ввиду малого расщепления по массе состояний чармония $1P$ χ_{c0} , χ_{c1} , χ_{c2} необходимо измерять 4-импульсы фотоны с наилучшим энергетическим разрешением, и этому требованию удовлетворяет калориметр PHOS. 4-

импульсы электронов и позитронов в эксперименте ALICE измеряются в центральной трековой системе ITS и TPC, которые позволяют также идентифицировать заряженные частицы по амплитуде сигнала, вызванного ионизационными потерями в трековых детекторах. Электромагнитный широкоапертурный калориметр EMCAL обладает аппаратным триггером на отбор событий, содержащих фотоны и электроны с энергией выше заданного порога.

Реконструкция состояний чармония в установке ALICE проводилась методом Монте-Карло моделирования с использованием генератора событий Pythia 8.210 [4]. Конфигурация генератора Pythia включала только процесс рождением различных состояний чармония с энергией в системе центра масс 13 ТэВ. Для повышения эффективности моделирования были включены только моды распада $\chi_{cJ} \rightarrow J/\psi \gamma$ и $J/\psi \rightarrow e^+e^-$. Для отбора событий в детекторах установки ALICE на продукты искомого распада налагались ограничения аксептанса по азимутальному углу и псевдобыстроте для фотонов, электронов и позитронов в соответствии с аксептансом детекторов. Моделирование быстрого отклика детекторов осуществлялось методом Монте Карло путем случайного искажения энергий фотонов и импульсов электронов и позитронов по нормальному распределению со среднеквадратичным отклонением в соответствии с параметрами энергетического разрешения фотонов и импульсного разрешения электронов и позитронов.

Числа зарегистрированных мезонов χ_{cJ} определялось по спектрам инвариантных масс суммы импульсов частиц - продуктов распадов, т.е. фотона, электрона и позитрона. Для частичного сокращения эффекта конечного разрешения детекторов были построены спектры разности инвариантных масс суммы 4-импульсов γe^+e^- и суммы 4-импульсов e^+e^- , что соответствует разности масс состояний χ_{cJ} и J/ψ , что показано на рис.1 для двух интервалов поперечных импульсов p_T чармония χ_{cJ} . Спектры разности инвариантных масс приведены с результатами фитирования суммой трех функций Гаусса, соответствующих трем состояниям чармония $\chi_{c0}, \chi_{c1}, \chi_{c2}$, параметры фитирования - амплитуда A , масса m и среднеквадратичное отклонение σ для каждого из состояний чармония показаны на рисунках.

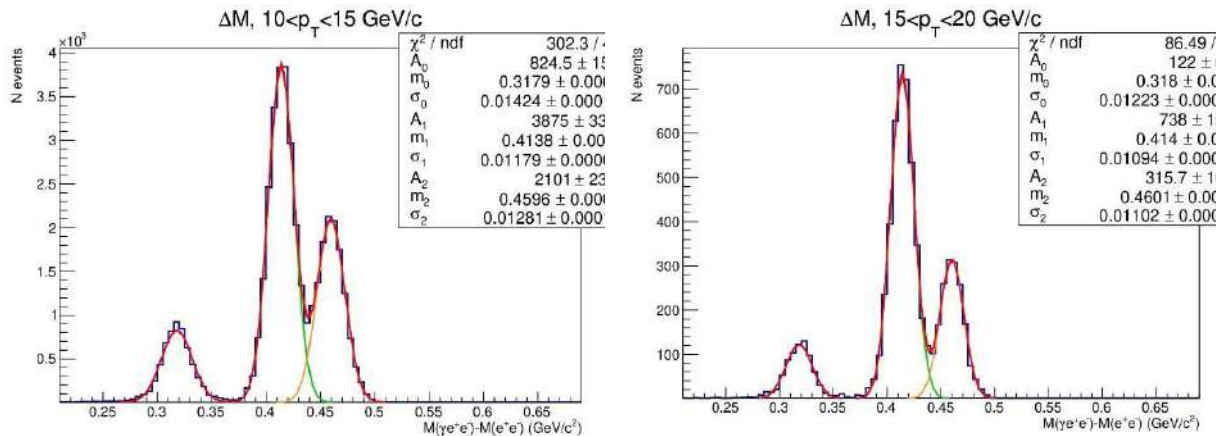


Рис. 1. Спектры инвариантных масс суммы 4-импульсов γe^+e^- (левый верхний рисунок) и разности инвариантных масс γe^+e^- и e^+e^- для трех интервалов p_T состояний чармония χ_{cJ} .

В дальнейшем планируется повышение реалистичности модели, которое будет достигаться сразу несколькими путями. Модель отклика детекторов будет оптимизирована с целью воспроизведения данных эксперимента ALICE. Будет проведено моделирование фоновых событий, для чего будет изменена конфигурация генератора будут включены фоновые процессы, т.е. все процессы КХД, реализованные в генераторе Pythia. При этом будет получена более реалистичная картина спектра инвариантных масс, исследование которой сможет дать ответы сразу на несколько вопросов, таких как параметры детекторов, при которых мы статистически сможем разделить пики ото всех трех состояний, количество зарегистрированных сигнальных событий по отношению к фоновым событиям и т.д. Кроме того, дальнейшее развитие работы может дать возможность формирование требований к новым конфигурациям эксперимента ALICE в будущих сессиях работы.

Литература

1. L. Kluberg, H. Satz, "Color Deconfinement and Charmonium Production in Nuclear Collisions," Published in: Relativistic Heavy Ion Physics, Landolt-Boernstein - Group I Elementary Particles, Nuclei and Atoms, 23, ISBN:

- 9783642015380 (Print), 9783642015397 (eBook). doi:10.1007/978-3-642-01539-7_13 [arXiv:0901.3831 [hep-ph]].
2. Г.В.Пахлова, П.Н.Пахлов, С.И.Эйдельман, “Экзотический чармоний”. УФН т.180, №3, 225 (2010). doi:10.3367/UFNr.0180.201003a.0225
 3. ALICE Collaboration, “The ALICE experiment at the CERN LHC”, JINST 3 S08002 (2008). doi:10.1088/1748-0221/3/08/S08002
 4. T. Sjöstrand, S. Ask, J.R. Christiansen, R. Corke, N. Desai, P. Ilten, S. Mrenna, S. Prestel, C.O. Rasmussen and P.Z. Skands, “An introduction to PYTHIA 8.2”, Comput. Phys. Commun. 191 (2015), 159-177, doi: 10.1016/j.cpc.2015.01.024, [arXiv:1410.3012 [hep-ph]].

УДК 539

Ограничения на кривизну Вселенной и параметры динамической темной энергии по данным полной формы энергетического спектра галактик и БАО

Чудайкин А.С.¹, Иванов М.М.², Долгих К.А.

¹Институт ядерных исследований РАН

²Центр космологии и физики частиц

³МГУ им. М.В. Ломоносова

Произведен анализ космологических моделей с ненулевой пространственной кривизной (Ω CDM) и модифицированной темной энергией (w_0 CDM, w_0wa CDM) с помощью данных крупномасштабной структуры Вселенной, нуклеосинтеза (BBN) и сверхновых. Данные ограничения полностью независимы от измерений анизотропии реликтового излучения. Полученные результаты согласуются с картиной плоской Вселенной, $\Omega_k = -0.043 \pm 0.036$ (68% C.L.). Анализ модифицированной темной энергии не выявил существенных отклонений от предсказаний стандартной космологической модели: ограничение на уравнение состояния темной энергии, которое определяется постоянным числом, согласуется с космологической постоянной, $w_0 = -1.031^{+0.052}_{-0.048}$ (68% C.L.). Этот вывод также справедлив для темной энергии с динамическим уравнением состояния $w = w_0 + w_a * z / (z+1)$, для которой $w_0 = -0.98^{+0.099}_{-0.11}$ и $w_a = -0.33^{+0.63}_{-0.48}$ (68% C.L.). Исключение сверхновых из каталога данных существенно не ослабляет полученные ограничения. Это показывает, что данных одного лишь нуклеосинтеза и крупномасштабной структуры Вселенной достаточно для определения сильных СМВ-независимых ограничений на различные расширения стандартной космологической модели.[1]

В работе используются каталоги галактик Слоановского цифрового неба. Для построения теоретических предсказаний используется современный аналитический аппарат на базе стандартной космологической теории возмущений. Все параметры теоретической модели, которые определяют нелинейное сгущивание галактик, считаются неизвестными, а по их значениям производится усреднение. Также в работе исследуется вклад гексадекаполя, который содержит дополнительную информацию о космологических параметрах.[1] Для вычислений используется метод Монте-Карловских Марковских цепей, реализованный в пакете *Montepython* с использованием модифицированного пакета *CLASS-PT* для численного расчёта двухточечных корреляционных функций с учетом однопетлевых поправок в рамках космологической теории возмущений.[2] Вычисление происходит не намного медленнее по сравнению с оригинальным пакетом *CLASS*.

Литература

1. Anton Chudaykin, Konstantin Dolgikh, Mikhail M. Ivanov // arXiv:2009.10106 [astro-ph.CO]
2. A.Chudaykin, M. M. Ivanov, O. H. Philcox, and M. Si-monovi'c, (2020), arXiv:2004.10607 [astro-ph.CO].

УДК 539.1.074.3

Определение точки столкновения ионов в установке MPD/NICA с помощью переднего адронного калориметра

А.О. Стрижак

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

В настоящее время большое внимание уделяется экспериментам, направленным на изучение свойств материи, получаемой в релятивистских ядро-ядерных столкновениях. Одной из основных целей таких экспериментов является исследование свойств кварк-глюонной материи (КГМ) и фазовой диаграммы сильновзаимодействующей материи. Это позволит решить следующие проблемы фундаментальной физики: нахождение критической точки на фазовой диаграмме квантовой хромодинамики (КХД), исследование фазовых переходов на фазовой диаграмме КХД, изучение свойств кварк-адронной смешанной фазы и т.д. Кроме того, экспериментальные данные помогут определить уравнение состояния ядерного вещества в области высоких температур и барионных плотностей. Первые эксперименты по исследованию свойств КГМ проводились на коллайдерах RHIC и LHC в области высоких энергий. Однако, наблюдается недостаток экспериментальных данных в области низких энергий $\sqrt{s_{NN}} = 2 - 10$ ГэВ/нуклон. В России, в Дубне строится ускорительный комплекс NICA, который будет работать в диапазоне энергий, перекрывающем данную область. Одним из основных будет эксперимент на встречных пучках MPD/NICA (Multi-Purpose Detector), который будет работать при энергиях $\sqrt{s_{NN}} = 4 - 11$ ГэВ/нуклон.

Передний адронный калориметр (FHCAL) – одна из составных частей MPD. Важнейшей задачей FHCAL является определение геометрии ядро-ядерного столкновения в MPD по распределениям спекторов (нуклонам, непосредственно не участвовавшим в столкновении). FHCAL состоит из двух плеч, расположенных симметрично относительно центра MPD. Каждое плечо калориметра включает 44 индивидуальных модуля, расположенных, как показано на рис. 1 (а). Поперечный размер модуля равен $15 \times 15 \text{ см}^2$. Модуль FHCAL имеет гетерогенную структуру и состоит из 42 пар пластин свинец-сцинтиллятор с толщинами 16 мм и 4 мм соответственно. Такое соотношение толщин выбрано для обеспечения компенсационного условия калориметра. Для наилучшего светосбора сигнал снимается с помощью интегрированного в сцинтилляторы спектросмещающего оптоволокну Kuraray Y11. Модули FHCAL включают семь продольных секций. Свет с шести сцинтилляторов одной секции регистрируется одним кремниевым фотоумножителем (*Hamamatsu MPPC S14160-3010P*). Данное решение обеспечивает продольную однородность светосбора. Схема съема света с сцинтилляторов модуля FHCAL показана на рис. 1 (б).



Рис. 1. Расположение модулей в плечах FHCAL (а) и структура секции модуля (б).

Для нахождения энерговыведения в FHCAL была проведена энергетическая калибровка модулей. Поскольку положение FHCAL будет фиксировано и калибровку на пучке сделать будет невозможно, то осуществить калибровку возможно только с помощью космических мюонов. Космические мюоны обладают достаточной интенсивностью потока, чтобы обеспечить быструю и надежную калибровку FHCAL, а энерговыведение мюонов в сцинтилляторах продольных секций слабо зависит от начального энергетического спектра. Были разработаны две методики калибровки модулей: индивидуальная калибровка модулей на околоразрешенных мюонах и одновременная калибровка группы модулей на мюонах в полном телесном угле. Основной проблемой метода индивидуальной калибровки модулей является идентификация мюонных сигналов. Были реализованы три варианта отбора мюонов: сравнение сигнала в двух, трех соседних и всех секциях модуля. Сигналы должны быть достаточно близки, так как энерговыведение мюонов во всех секциях практически одинаково. Накопленный в каждой секции энергетический спектр имеет пик, положение которого соответствует энерговыведению горизонтального мюона в секции.

С целью увеличения статистической точности калибровки был разработан метод одновременной калибровки группы модулей. Первым этапом данного метода является реконструкция мюонного трека при известном энерговыведении в секциях модулей калориметра. Далее, скорректировав пройденный мюоном в сцинтилляторе путь можно получить энергетический спектр мюонов,

если бы все они проходили горизонтально вдоль оси модуля. Первоначальный (синий) и скорректированный (зеленый) энергетические спектры мюонов представлены на рис. 2 (а). Положение скорректированного спектра отвечает энергосодержанию горизонтального мюона в секции. Чтобы проверить качество собранных модулей были получены световыходы секций. Средние световыходы для 9 модулей калориметра представлены на рис. 2 (б). При получении световыходов использовались результаты абсолютной калибровки электронных каналов.

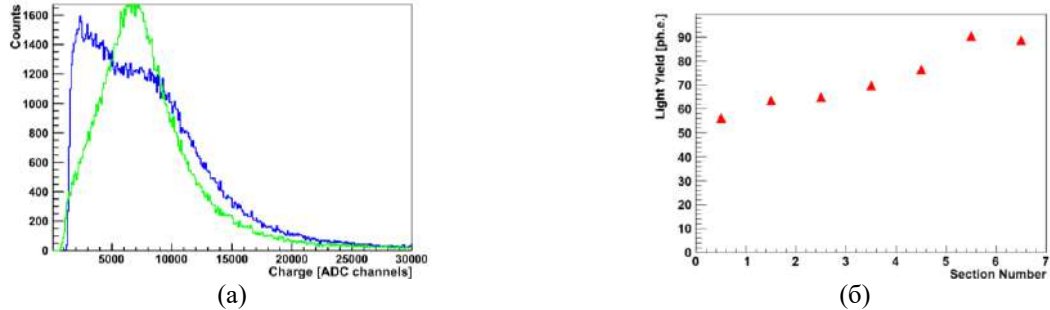


Рис. 2. Первоначальный (синий) и скорректированный (зеленый) энергетические спектры мюонов (а), световыход секций модуля (б).

На ранних этапах работы MPD, в случае отсутствия детекторов для прецизионного измерения координаты точки столкновения ионов, для настройки пучка будут использоваться данные с FHCAL. С этой целью был разработан метод реконструкции точки столкновения ионов по энергосодержанию в калориметре. Было проведено Монте-Карло моделирование, в котором пучки сталкивались в точках с расстоянием 0 см, 30 см, 60 см от центра вдоль оси MPD. На рис. 3 (а) приведена зависимость асимметрии энергосодержания во внутренних (красные на рис. 2(а)) и внешних (зеленые на рис. 2(а)) модулях от энергосодержания в калориметре. Были выделены три класса событий по центральности, как это показано на рисунке. Красным цветом обозначены центральные события, синим – периферические, зеленым – полупериферические. Для трех классов событий была построена зависимость среднего значения другого вида асимметрии энергосодержания в левом и правом плечах калориметра от точки столкновения ионов. (рис. 3 (б)). В качестве ошибок взяты ширины распределения Гаусса. Как видно, восстановление точки столкновения по центральным событиям обеспечит наилучшую точность. Для точки 0 см пространственная точность данного метода составит 21 см.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) № 18-02-40065.

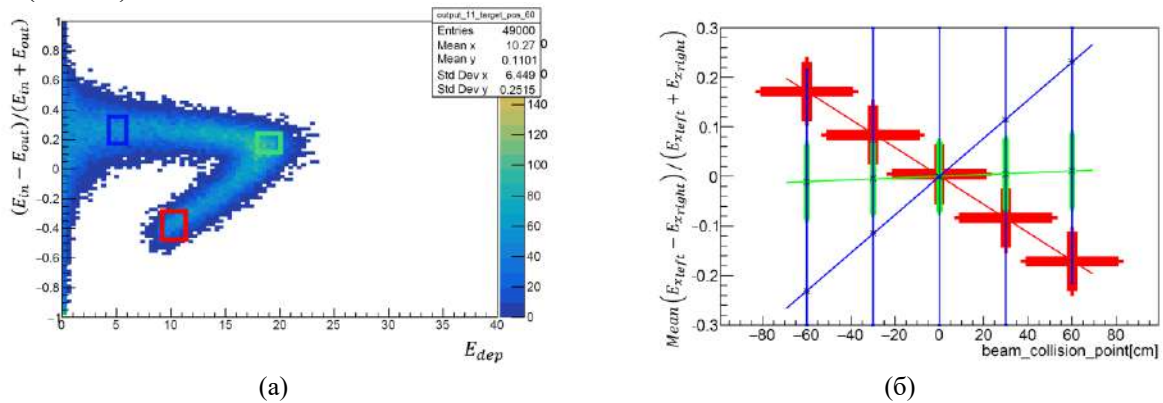


Рис. 3. Зависимость асимметрии энергосодержания во внутренних и внешних модулях (а), зависимость асимметрии энергосодержания в плечах калориметра от точки столкновения ионов (б).

Литература

1. http://mpd.jinr.ru/wp-content/uploads/2018/05/MPD_TDR_FHCAL_28_05_2018.pdf
2. Ivashkin A. et al. “Amplitude parameters of modules for hadron calorimeter at MPD/NICA”

Проектирование системы метаданных физических событий эксперимента BM@N мегапроекта NICA

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

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Институт ядерных исследований РАН

³ Объединённый институт ядерных исследований

Эксперимент BM@N (Baryonic Matter at Nuclotron) в Объединенном институте ядерных исследований предназначен для изучения свойств ядерной материи при взаимодействии пучков легких и тяжелых ионов с энергиями 1–6 ГэВ на нуклон с фиксированной мишенью [1]. Данный эксперимент является первым экспериментом проекта NICA (Nuclotron-based Ion Collider fAcility), который также будет включать коллайдерные эксперименты на встречных пучках протонов и ионов.

Для моделирования, анализа и визуализации данных эксперимента коллабораций BM@N была разработана программная среда BmnRoot, основанная на программных пакетах CERN ROOT и FairRoot [2]. Набор данных BM@N был начат в 2015 году, на сегодняшний день проведено 7 технических сеансов с общим набором порядка 450 миллионов событий. Подготовленные для физического анализа реконструированные события эксперимента хранятся в виде ROOT-файлов (формата DST) в хранилище с распределенной файловой системой.

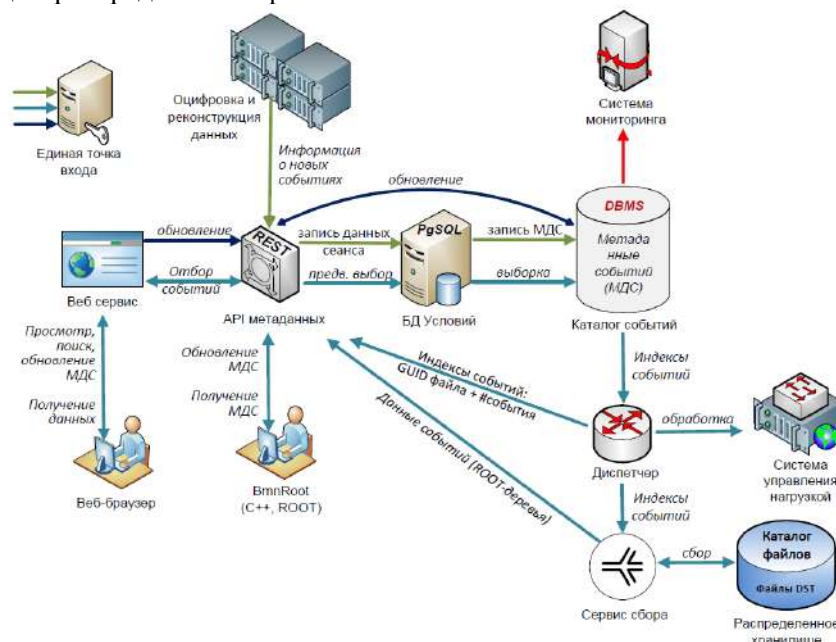


Рис. 1. Общая архитектура системы метаданных событий эксперимента VM@N

Для проведения необходимого физического анализа реконструированных событий эксперимента важна возможность достаточно быстро выбирать только требуемые события по таким параметрам как, например, количество образовавшихся частиц с разными зарядами, сработавшие детекторы, восстановление первичной и вторичных вершин. Для решения данной задачи необходима разработка системы метаданных событий на базе каталога полученных событий столкновения частиц. На рис. 1 представлена разработанная общая архитектура проектируемой системы. Специализированный программный API-сервис будет предоставлять функции записи информации о новых событиях и получения списка событий по запросу. Существующая база данных (БД) условий хранит общую информацию о всех запусках в сеансах эксперимента, например: энергию пучка частиц, тип частицы, триггеры, магнитное поле. Центральным элементом разрабатываемой системы метаданных является собственная база данных, содержащая каталог метаданных событий, и обозначенная на рис. 1 как МДС. База данных МДС должна обладать достаточной производительностью для хранения и быстрой выборки событий по критериям из порядка 10^9 записей. В связи с этим, в ходе проектирования поставлен вопрос о выборе СУБД, учитывающей достаточно большой объем хранимых данных.

Системы индексации и метаданных событий используются в других экспериментах физики высоких энергий, в частности ATLAS [3] и BESIII [4]. В качестве базы данных в ATLAS изначально использовалась реляционная СУБД Oracle, но с ростом объема данных потребовалась новая система, которая была реализована на основе NoSQL-технологии СУБД HBase. Сравнение производительности реляционной СУБД MySQL и не реляционной HBase, проведенное в работе [4], также отдает преимущество последней. Тем не менее окончательный выбор БД для конкретной задачи определенного эксперимента должен осуществляться после тестирования в реальных или приближенных к реальным условиям и с учетом таких факторов, как ожидаемый объем данных, сложность администрирования и устранения сбоев, необходимые серверные мощности, предполагаемое будущее развитие системы.

В рамках данной работы были проведены тесты нескольких промышленных СУБД, которые могут использоваться для поставленной цели: PostgreSQL, Apache HBase и Cassandra. Количество тестовых событий, которые были записаны в соответствующие БД, составляет 10^9 .

Особенностью системы является необходимость поддерживать достаточно сложные запросы с фильтрацией по большому числу полей, поэтому построение индекса БД является в этом случае отдельной задачей. В отсутствие индекса, либо при его неэффективности, при запросе к БД происходит фильтрация строк с поиском по всей таблице, что может привести к низкой производительности. Тем не менее, тесты производительности показали, что даже в случае полнотабличного сканирования результаты могут быть вполне приемлемыми. Так, на сервере с 18-ядерным процессором Intel Core i9-10900F, 64 ГБ оперативной памяти и NVMe-диском SSD, базе данных на PostgreSQL версии 12.4 требуется не более 30 секунд на обработку даже полнотабличных запросов с вышеуказанным количеством тестовых событий. В данном случае быстрота обеспечивается тем фактом, что таблица тестовых событий полностью кэшируется в оперативной памяти. В любом случае разработка API-сервисов будет проводиться по модульному принципу с учетом обновления аппаратных компонент в будущем.

Важной особенностью разрабатываемой системы является также возможность возвращения отобранных событий эксперимента сразу в формате ROOT-дерева, то есть не только в виде индексов событий, но и самих данных. Для этого будут разработаны дополнительные программные сервисы, выполняющие функции диспетчера заданий и сервиса сборки данных.

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

Литература

1. *Kapishin M. (BM@N). Studies of baryonic matter at the BM@N experiment (JINR) // Nucl. Phys. A. 2019. V. 982. P. 967.*
2. *Batyuk P., Gertsenberger K., Merts S., Rogachevsky O. The BmnRoot framework for experimental data processing in the BM@N experiment at NICA // EPJ Web of Conferences. 2019. V. 214. P. 05027.*
3. *Barberis D., et al. The ATLAS EventIndex: Full chain deployment and first operation // Nuclear and Particle Physics Proceedings. 2016. V. 273–275. P. 913.*
4. *S. Dai, et al. Evaluating Index Systems of High Energy Physics // Communications in Computer and Information Science. 2019. V. 911. P. 15.*

УДК 539.1

Возможные методы прохождения критической энергии в ускорительном комплексе NICA для поляризованного протонного пучка

Колокольчиков С.Д., Сеничев Ю.В

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

Ускорительный комплекс коллайдера NICA изначально проектировался с возможностью реализации экспериментов по столкновению тяжелых ионов, а также эффективного ускорения протонов и дейтронов для реализации поляризованной программы.

Для тяжелых ионов золота $^{79}\text{Au}_{197}$ с максимальной энергией 4.5 ГэВ/нуклон критическая энергия коллайдера равна $E_{tr}^{Au-Au} = 5,7$ ГэВ ($\gamma_{tr}^{Au-Au} = 7,1$). Таким образом, проблем с прохождением критической энергии не возникает, что было изначально учтено при проектировании магнито-

оптической структуры. Такое значение критической энергии было достигнуто выбором частоты бетатронных колебаний в горизонтальной плоскости ν_x , которая при условии регулярности структуры арок, состоящих из одинаковых ячеек ФОДО, должна быть больше максимального значения фактора Лоренца во всем интервале энергии $\nu_x \approx \gamma_{tr}^{Au} > \gamma_{max}^{Au} \approx 5.8$. В данном случае была выбрана частота $\nu_{x,y}^{Au} = 9,44$.

При ускорении протонов магнитная жесткость в поворотных арках остаётся неизменной $R_{arc} \cdot B_{bend} = \frac{A \cdot mc \gamma \beta}{eZ} \approx 45$ для любых частиц при максимальном магнитном поле в поворотных магнитах. Тем самым, определяется максимально возможная энергия для протонов $E_{max}^p = 12,4$ ГэВ ($\gamma_{tr}^{Au-Au} = 14,3$), что заведомо выше критической энергии для ионной регулярной структуры $E_{tr}^{Au-Au} = 5,7$ ГэВ ($\gamma_{tr}^{Au-Au} = 7,1$). Таким образом, для ускорения протонов необходимо либо скачкообразное прохождение через критическую энергию, либо поднятие критической энергии до величины $\gamma_{tr}^p > \gamma_{max}^p = 14,3$. В данной статье будет приведен метод поднятия критической энергии путем резонансной модуляции дисперсионной функции в арках коллайдера. Для протонного пучка время внутрипучкового нагрева возрастает на порядки по сравнению с тяжелыми ионами. Поэтому критическая энергия может подниматься за счет вариации дисперсии без опасения большого влияния внутрипучкового рассеяния.

Для поднятия критической энергии рассмотрена вариация дисперсионной функции, которая осуществляется при помощи модуляции градиента квадрупольных линз на арках коллайдера.

$$\alpha = \frac{1}{\gamma_{tr}} = \frac{1}{C} \int_0^C \frac{D(s)}{\rho(s)} ds, \quad (1)$$

$$\frac{d^2 D}{ds^2} + [K(s) + \varepsilon k(s)]D = 0, \quad (2)$$

Где $K(s) = \frac{e}{p} G(s)$, $\varepsilon k(s) = \frac{e}{p} \Delta G(s)$, $G(s)$ – градиент магнитооптических линз, $\Delta G(s)$ – суперпериодическая модуляция градиента.

Литература

1. Yu. V. Senichev and A. N. Chechenin. Theory of “Resonant” Lattices for Synchrotrons with Negative Momentum Compaction Factor. Journal of Experimental and Theoretical Physics, 2007, Vol. 105, No. 5, pp. 988–997
2. Yu. V. Senichev and A. N. Chechenin. Construction of “Resonant” Magneto-Optical Lattices with Controlled Momentum Compaction Factor Journal of Experimental and Theoretical Physics, 2007, Vol. 105, No. 6, pp. 1141–1156.
3. Yu. Senichev, A. Chechenin, S. Kostromin. Variable Transition Energy Lattices based on different periodic cells with various types of dispersion suppressor.

Секция биофизики

Председатель: В.В. Чупин (д.х.н., зав. кафедрой, зав. лабораторией)

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

Секретарь: С.О. Мишина

Дата: 25.11.2020 Время: 14:00

УДК 577.322.9

Анализ влияния электростатических зарядов цитохрома с на эффективность реакций с его участием

Д.А. Полетаева, Р.А. Котельникова, И.И. Файнгольд, А.И. Котельников

Институт проблем химической физики РАН

Цитохром с – небольшой водорастворимый гемовый белок дыхательной цепи митохондрий, в функции которого входит перенос электрона от цитохром с-редуктазы к цитохром с-оксидазе. Цитохром с существует в двух взаимозаменяемых формах: восстановленной (Fe^{2+}) или окисленной (Fe^{3+}). Восстановленная форма цитохрома с в меньшей степени связывается с анионами и менее прочно с отрицательно заряженными мембранами [1]. Молекула цитохрома с при нормальных pH имеет восемь положительно заряженных групп [2]. Одним из возможных механизмов функционирования цитохрома с является перенос электрона через край гема, доступного молекулам растворителя [3]. При этом считается существенной роль электростатических зарядов на поверхности белка, обеспечивающих эффективное комплексообразование с оксидазным и редуктазным компонентами электрон-транспортной цепи.

Для оценки влияния электростатических зарядов белковой глобулы цитохрома на эффективность реакции с другими заряженными молекулами в растворе в данной работе исследовался эффект тушения триплетных состояний эозина Y гемом цитохрома при различных значениях ионной силы раствора. Предполагается, что тушение фосфоресценции гемом цитохрома с осуществляется по обменному механизму, и данная реакция может моделировать реакции переноса электрона с участием цитохрома с.

Анализ зависимости значений k_q - константы скорости тушения фосфоресценции триплетного зонда эозина Y цитохромом с в буфере от ионной силы раствора проводился с использованием уравнение Дебая-Смолуховского, согласно которому бимолекулярная константа скорости реакции k_q в случае электростатически заряженных реагентов выражается формулой:

$$k_d = 4\pi D R \alpha_{\text{эл}} \quad (1)$$

$$\alpha_{\text{эл}} = \frac{1}{\sigma \int_{\sigma}^{\infty} \exp[V(R)/kT] \frac{dr}{r^2}}, \quad (2)$$

где $V(R)$ - потенциал электростатического взаимодействия [4].

При малых значениях ионной силы уравнение (1) преобразуется в уравнение Бренстеда:

$$\lg k_q = \lg k_q^0 + z_1 z_2 \sqrt{\mu} \quad (3)$$

Согласно уравнению Бренстеда, из наклона линейного участка зависимости $\lg k_q$ от $\sqrt{\mu}$ можно определить величину эффективного заряда одного из реагентов z_1 , зная величину заряда z_2 второго реагента.

В проведенном эксперименте в качестве триплетного зонда использовался эозин Y, имеющий заряд (-2) при нейтральных pH.

Ионная сила раствора изменялась введением в образец концентрированного раствора NaCl. Величина k_q измерялась из анализа кинетических кривых затухания фосфоресценции эозина Y при различных концентрациях цитохрома *c*.

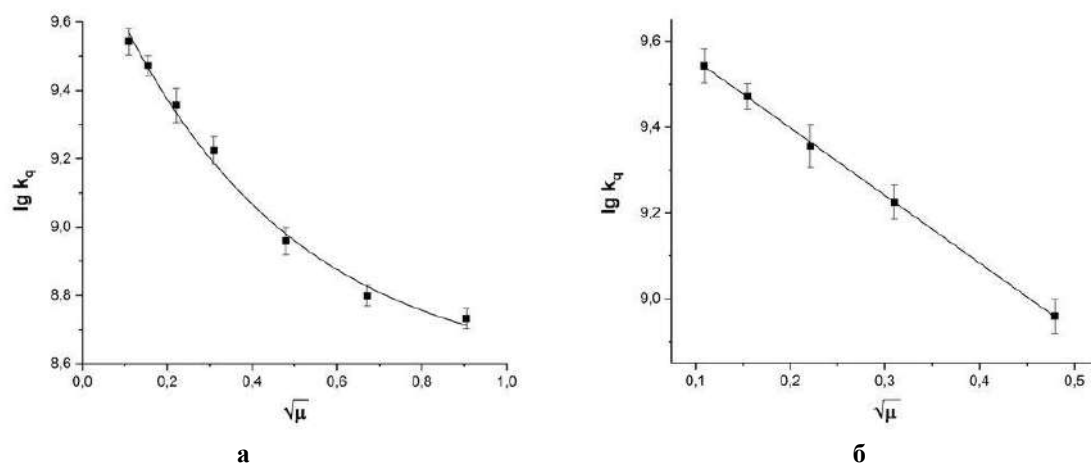


Рис. 1. Зависимость константы скорости тушения фосфоресценции эозина цитохромом *c* (k_q) от ионной силы (μ) раствора (а); линейный участок зависимости (б).

Цитохром *c* при pH=7 имеет восемь положительно заряженных лизиновых групп, эозин в этих условиях находится в растворе в виде дианиона. Как видно из рисунка 1, зависимость $\lg k_q$ от $\sqrt{\mu}$ линейна при $\sqrt{\mu} < 0.5$. При больших ионных силах зависимость определяется на величине $k_q = 8 \cdot 10^8 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$, обозначенной как константа тушения при «бесконечной» ионной силе. Исходя из того, что $z_1 = -2$ для эозина Y, из наклона линейного участка этой зависимости определена величина эффективного заряда цитохрома *c*, которая составила +0.79. Несмотря на то, что полный заряд цитохрома *c* в этих условиях +8, можно полагать, что лишь одна лизиновая группа эффективно влияет на процесс столкновения эозина с цитохромом *c*, с той частью его поверхности, на которой находится выступающий край гема, принимающий участие в каталитическом акте. Такой подход позволяет показать важную роль как локальных зарядов цитохрома *c*, так и зарядов в активных центрах других белков – партнеров цитохрома *c* в реакциях переноса электрона, на эффективность его взаимодействия с этими белками.

Литература

1. Nicholls P. Cytochrome *c* binding to enzymes and membranes // Biochim. Biophys. Acta - Rev. Bioenerg. 1974. V. 346. P. 261.
2. Holwerda R. A., Wherland S. & Gray H. B. Electron Transfer Reactions of Copper Proteins. Annu. Rev. Biophys. Bioeng. 1976. V. 5. P. 363.
3. Moore G. R. et al. Electron transfer in biology. The function of cytochrome *c*. Faraday Discuss. Chem. Soc. 1982. V. 74. P. 311.
4. Hammes G. G. & Alberty R. A. The Influence of the Net Protein Charge on the Rate of Formation of Enzyme–Substrate Complexes. J. Phys. Chem. 1959. V. 63. P. 274.

УДК 57.083.18

Анализ микрофлоры Азовского моря, способной к синтезу аутоиндуктора кворум-чувствительной системы LuxR/LuxI типа

Е.С. Щеглова¹, С.В. Баженов¹, И.В. Манухов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национально-исследовательский университет)

²ГосНИИ генетики и селекции промышленных микроорганизмов (ГосНИИгенетика)

Чувство кворума или quorum sensing (QS) – это способность координировать поведение бактерий в зависимости от плотности их популяции. QS система LuxI/LuxR типа *Aliivibrio fischeri* регулирует способность клеток к биолюминесценции, используя для этого сигнальную молекулу

аутоиндуктор (АИ) на основе ацилгомосеринлактона (АГЛ). Данное исследование посвящено поиску и видовой идентификации не светящихся бактерий, способных к продукции АГЛ.

С данной целью в августе 2020 г. была проведена экспедиция в Таганрог и Ростов. В результате проведенных работ было собрано 35 образцов микрофлоры рыб Азовского моря. Из них 29 образцов содержимого кишечника *Neogobius fluviatilis*, 4 образца содержимого кишечника рыб рода *Carassius*, 2 – *Rutilus heckelii*. Также было собрано 7 образцов воды и ила Азовского моря.

Выявление синтезирующих АИ образцов проводилось с помощью сконструированного цельноклеточного биосенсора *Escherichia coli* MG1655 pFR pSVRAF, обладающего высокой чувствительностью к АИ. Плазмида pFR содержит гены *luxCDABE P. luminescence* под контролем промотора *luxICDABEG A. fischeri*. Помимо этого в данной плазмиде находится ген регуляторного белка LuxR *A. fischeri*. При наличии АИ в клетке белок LuxR связывается с АИ и в связанном виде индуцирует экспрессию генов люминесценции. Высокая чувствительность биосенсора к АИ обеспечивается наличием в клетке дополнительного гена *luxR* под контролем tet промотора, обеспечивающего увеличенную экспрессию LuxR, на плазмиде pSVRAF. Цельноклеточный биосенсор MG1655 pFR pSVRAF чувствителен к концентрациям АИ от 0,1 нМ. Измерения с помощью данного биосенсора показали, что 5 образцов содержат бактерии, производящие АИ.

В ходе расчистки данных образцов был выделен ряд бактериальных штаммов, способных к продукции АИ 1 типа. Среди изолированных штаммов не было обнаружено люминесцентных. Родовидовая идентификация данных изолированных штаммов проводилась с помощью филогенетического анализа последовательностей 16S рРНК генов. Анализ показал, что в кишечнике рыб, а также в воде Азовского моря содержатся бактерии рода *Aeromonas* мезофильных видов *Aeromonas veronii*, *Aeromonas hydrophila*. Бактерии данного рода – повсеместно распространенные водные бактерии, являющиеся патогенами преимущественно пойкилотермных животных, таких как земноводные, рыбы и амфибии. В частности, у рыб они вызывают геморрагический сепсис и системный фурункулез [2]. Данные бактерии обладают QS системой первого типа, ответственной за факторы вирулентности [3].

Полученные результаты подтверждают, что биосенсорный штамм MG1655 pFR pSVRAF с дополнительной копией гена *luxR* применим для поиска АГЛ в природных образцах и обнаружения бактерий, синтезирующих АГЛ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-34-50066 и Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение # 075-00337-20-03, проект FSMG-2020-0003).

Литература

1. De Kievit T.R. et al. Bacterial quorum sensing in pathogenic relationships// Infection and Immunity. 2000. V. 68, N 9. P. 4839–4849.
2. Tomás J.M. The Main Aeromonas Pathogenic Factors// ISRN Microbiol. 2012 V. 2012, P. 1–22.
3. Natrah F.M.I. et al. The impact of quorum sensing on the virulence of *Aeromonas hydrophila* and *Aeromonas salmonicida* towards burbot (*Lota lota* L.) larvae// Vet. Microbiol. 2012 V. 159, N 1–2. P. 77–82.

УДК 577.322.4

Влияние параметров аминокислотной последовательности на стехиометрию с-ринг АТФ-синтазы

С.Д. Осипов¹, А.В. Власов^{1,2,3}, К.В. Ковалев^{1,2,4,5}, А.И. Куклин^{1,3}, В.И. Горделий^{1,4,5}

¹Московский физико-технический институт (национально-исследовательский университет)

²Institute of Crystallography, RWTH Aachen University

³Объединенный институт ядерных исследований

⁴ Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes—Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives—CNRS

⁵ JuStruct: Jülich Center for Structural Biology

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 заставляет вращаться ротор с_n-ринг, что вызывает конформационные изменения в F₁ части АТФ-синтазы, катализирующей синтез АТФ.

Важным биоэнергетическим параметром является соотношение числа синтезированных молекул АТФ к числу протонов, прошедших через с-ринг, $АТФ/H^+$. Этот параметр зависит от числа мономеров c_1 , формирующих кольцо c_n . В общем виде он равен $\frac{3}{n}$. Было показано [2], что стехиометрия c_n , то есть число n , определяется аминокислотной последовательностью c_1 , однако вид этой зависимости до сих пор остается неясным. Для многих живых организмов неизвестна стехиометрия c_n , и, таким образом, неизвестно соотношение $АТФ/H^+$.

В данной работе были проанализированы более 25 тысяч аминокислотных последовательностей мономеров c_1 из разных видов живых организмов из базы данных NCBI [3]. Для белковых комплексов c_n -ринг с известной pdb-структурой были найдены положения аминокислот из соседних цепей, контактирующие между собой. Была проанализирована связь между стехиометрией c_n и аминокислотами, находящимися в этих положениях. Кроме того, изучалось влияние на стехиометрию параметров аминокислот, стоящих в конкретных положениях, таких, как гидрофобность, заряд, и др.. Роль различных участков аминокислотной последовательности c_1 в стехиометрии кольца c_n обсуждается.

Литература

1. Vlasov, A. V., et al. "Unusual features of the c-ring of F 1 FO ATP synthases." *Scientific reports* 9.1 (2019): 1-11.
2. Pogoryelov, Denys, et al. "Engineering rotor ring stoichiometries in the ATP synthase." *Proceedings of the National Academy of Sciences* 109.25 (2012): E1599-E1608.
3. <https://www.ncbi.nlm.nih.gov>

УДК 577.31

Гибридизационные свойства фосфорилгуанидиновых олигонуклеотидов при низкой концентрации олигомеров в растворе

Е.Н. Кольцов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Цель данной работы - сравнении термодинамических параметров нативных и фосфорилгуанидиновых олигонуклеотидов при низких концентрациях в контексте модели двух состояний. В качестве модельных были выбраны 12 15 и 20 звенные олигонуклеотиды. На 5' конце одной из цепи находился краситель FAM, на 3' – BHQ.

Исследования проводились в рамках модели двух состояний, при которой в ходе процесса плавления цепи нуклеотидов из двойного комплекса образуются две комплементарные цепи без промежуточных состояний [1] (1) – (2):



$$[A]_0 + [B]_0 = C_t \quad (2)$$

Где $[A]_0$ и $[B]_0$ – начальные концентрации, K – константа равновесия, C_t – суммарная концентрация. Исходя из данной модели можно рассчитать термодинамические параметры системы методом подгонки экспериментальной кривой, а также классическим концентрационным методом (3) – (5):

$$\Delta G_T^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0 \quad (3)$$

$$K(T) = \exp\left(-\frac{\Delta G_T^0}{RT}\right) \quad (4)$$

$$\frac{1}{T_{пл}} = \frac{R}{\Delta H^0} \ln\left(\frac{C_t}{4}\right) + \frac{\Delta S^0}{\Delta H^0} \quad (5)$$

Где ΔG_T^0 - свобода энергии Гиббса, R - универсальная газовая постоянная, $T_{пл}$ - температура плавления дуплексной цепи, ΔH^0 и ΔS^0 - энтальпия и энтропия реакции. Термодинамические параметры рассчитаны при нормальных условиях [2].

В ходе работы использовались два метода плавления – с оптической и флуоресцентной регистрацией сигнала.

После проведения экспериментов были получены следующие данные (рис. 1-2):

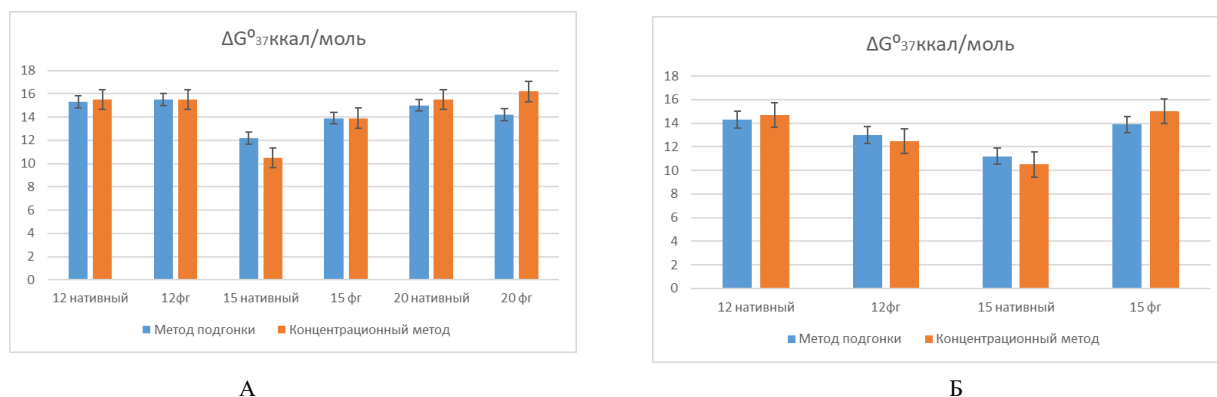


Рис.1. Сравнение изменения свободной энергии Гиббса для различных комплексов при разных методах обработки данных при оптической (А) и флуоресцентной (Б) регистрации сигнала.

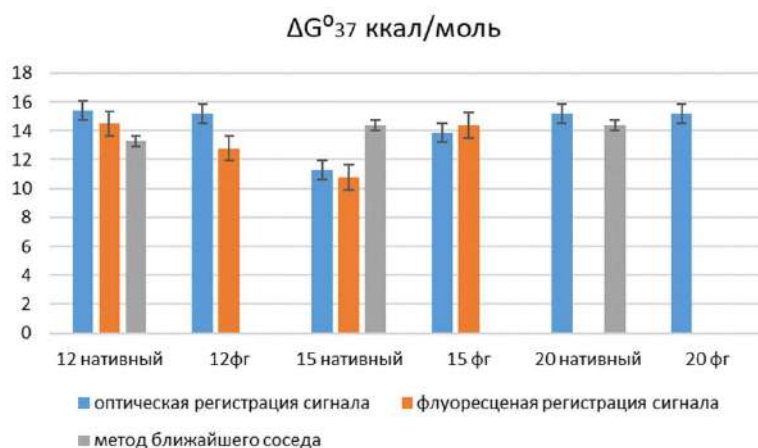


Рис.2. Сравнение расчётов при разных регистрациях сигнала с методом ближайшего соседа

Исходя из полученных данных, были сделаны выводы об эффективности формирования комплексов фосфорилгуанидиновых олигонуклеотидов с ДНК при их концентрациях в растворе от 10 мкМ до 50 нМ. Показано, что:

- 1) методом термической денатурации с оптической регистрацией сигнала возможно определение термодинамических параметров формирования бимолекулярных комплексов нативных и фосфорилгуанидиновых олигонуклеотидов вплоть до концентраций 0.1 мкМ;
- 2) значения термодинамических параметров (ΔH_0 , ΔS_0 , и ΔG_{037}) формирования комплексов при низких концентрациях комплексов близки к таковым при более высоких в случае применимости модели двух состояний;
- 3) методом термической денатурации с оптической регистрацией сигнала при анализе гибридизационных свойств фосфорилгуанидиновых олигонуклеотидов могут давать различные результаты. Необходим дополнительный анализ для их интерпретации.
- 4) При использовании флуоресцентных методов регистрации кривых термической денатурации необходимо учитывать нелинейную зависимость сигнала флуоресценции одноцепочечного и двуцепочечного состояний нуклеиновых кислот.

Дополнительно исследовалась система с интеркалирующим красителем (бромистым этидием), однако результаты не были получены в силу особенностей поведения спектров термической денатурации.

Литература

1. Кантор Ч., Шиммел П. Биофизическая химия. // М. Мир. 1984, т. 2.
2. A.A. Lomzov, Yury N. Vorobjev, and Dmitrii V. Pyshnyi Evaluation of the Gibbs Free Energy Changes and Melting Temperatures of DNA/DNA Duplexes Using Hybridization Enthalpy Calculated by Molecular Dynamics Simulation// The journal of physical chemistry. November 16, 2015.

Двухэтапная активация lux-оперона бактерий *Aliivibrio logei*

С.В. Баженов¹, И.В. Манухов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Государственный научно-исследовательский институт генетики и селекции промышленных микроорганизмов Национального исследовательского центра "Курчатовский институт"

Чувство кворума или quorum sensing (QS) – это способность бактерий регулировать экспрессию отдельных генов и оперонов в зависимости от плотности популяции, синхронизируя таким образом свое поведение. Впервые это свойство было обнаружено и описано у люминесцирующих морских бактерий вида *Aliivibrio fischeri*. В регуляции люминесценции клеток *A. fischeri* ключевые роли играют гены *luxR* и *luxI* [1]. LuxR – белок регулятор, способный в присутствии аутоиндуктора (АИ, сигнального вещества, свободно проникающего через клеточную мембрану и служащего для определения плотности популяции) индуцировать транскрипцию генов *luxICDABEG*. LuxI – синтетаза АИ. Гены *luxCDABEG* кодируют люциферазу и редуктазы, вместе обуславливающие способность клеток к люминесценции. Таким образом, скорость синтеза АИ клетками и люминесценция регулируются совместно у бактерий *A. fischeri* и возрастают одинаково при достижении пороговой концентрации АИ. У психрофильных бактерий *Aliivibrio logei* и *Aliivibrio salmonicida* архитектура lux-оперона значительно отличается: ген *luxI* расположен отдельно от основной кассеты генов *luxCDABEG*, а регуляторный ген представлен двумя гомологами *luxR1* и *luxR2* [2,3].

В данной работе исследуется регуляция lux-оперона в зависимости от концентрации аутоиндуктора *luxI/luxR* QS системы – N-3-оксогексаноил-L-гомосерин лактона (3OC6-HSL). При культивировании клеток *A. logei* Skal, BM18-2 и K18-44 (изоляты из Баренцева, Белого и Берингова морей, соответственно) с измерением люминесценции, оптической плотности и концентрации АИ было показано, что LuxI/LuxR QS система срабатывает в два этапа: сначала при средних плотностях культур (OD₆₀₀ от 0,5 до 1,5) увеличивается скорость синтеза АИ в расчете на 1 клетку, затем в поздней логарифмической фазе роста или даже в стационарной (OD₆₀₀ от 2 до 5) увеличивается светимость клеток. При культивировании клеток *A. logei* с внесением экзогенного АИ в среду было показано, что экспрессия гена *luxI* усиливается при концентрациях АИ от 10 до 100 нМ, а экспрессия генов *luxCDABEG* усиливается при больших концентрациях — от 1 до 10 мкМ. Данные результаты согласуются с экспериментами по изучению АИ-зависимой регуляции промоторов генов *luxI* и *luxCDABEG* *A. logei* в гетерологичной системе клеток *Escherichia coli* [4]. В наблюдаемых различиях в свойствах промоторов важную роль играют отличия в последовательности ДНК сайтов связывания LuxR-белков: замена 4 нуклеотидов, отличающих промоторы генов *luxI* и *luxCDABEG* *A. logei*, при прочих равных приводит к изменению амплитуды АИ-зависимой активации и чувствительности к АИ промотора на 1 порядок при измерениях с использованием гибридных плазмид и клеток *E. coli*.

Таким образом, наблюдается двухэтапное срабатывание LuxI/LuxR QS системы бактерий *A. logei*, при котором синтез АИ усиливается при достижении концентрации АИ в среде значений порядка 10 нМ и достигает максимума при 100-1000 нМ, а люминесценция начинает возрастать лишь при концентрациях АИ в среде порядка 1 мкМ и достигает максимума при 10 мкМ. Что позволяет предположить, что отличия в генной организации QS систем мезофильных *A. fischeri* и психрофильных *A. logei* обуславливают повышенную приспособленность последних к обитанию в более бедных питательными веществами условиях северных морей, позволяя экономить ресурсы за счет индукции люминесценции лишь в условиях более плотной культуры клеток.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №19-34-90020 и Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение # 075-00337-20-03, проект FSMG-2020-0003).

Литература

1. Engebrecht J., Nealson K., Silverman M. Bacterial bioluminescence: Isolation and genetic analysis of functions from *Vibrio fischeri* // Cell. 1983. V. 32. P. 773–781.
2. Manukhov I.V., Khrul'nova S.A., Baranova A., Zavilgelsky G.B. Comparative analysis of the lux operons in *Aliivibrio logei* KCh1 (a Kamchatka Isolate) and *Aliivibrio salmonicida* // J Bacteriol. 2011. V. 193. P. 3998–4001.
3. Хрульнова С.А., Марышев И.В., Куликовский А.Д., Манухов И.В., Завильгельский Г.Б. Сравнительный анализ "Quorum Sensing" систем у психрофильных *Aliivibrio logei* и мезофильных *A. fischeri* светящихся морских бактерий // Биологические мембраны. 2012. Т. 29. С. 362–366.

4. Khrulnova S.A., Baranova A., Bazhenov S.V., Goryanin I.I., Konopleva M.N., Maryshev I.V., Salykhova A.I., Vasilyeva A.V., Manukhov I.V., Zavilgelsky G.B. 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. P. 717–724.

УДК 577.322.7

Измерение кинетики бактериородопсина в присутствии гуанидин-гидрохлорида методом лазерной время-разрешенной спектроскопии

А.И. Ку克林^{1,2}, И.В. Чижов³, Д.В. Соловьев^{1,2,4}, А.В. Власов^{1,2,5}, Ю.Л. Рижиков^{1,2}, А.А. Коган¹, Г. Бюлдит¹, В.И. Горделий^{1,6,7,8}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый Институт Ядерных Исследований

³Institute for Biophysical Chemistry, Hannover Medical School

⁴Институт проблем безопасности атомных электростанций НАН

⁵Institute of Crystallography, RWTH Aachen University

⁶Institute of Biological Information Processing (IBI-7: Structural Biochemistry)

⁷JuStruct: Jülich Center for Structural Biology, Forschungszentrum Jülich

⁸Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS

Бактериородопсины (BR) — семейство мембранных светочувствительных белков, осуществляющих перенос протонов через мембрану. BR является одной из самых простых известных активных транспортных систем, позволяющих детально изучать важные молекулярные механизмы, поэтому область изучения данных белков активно развивается.

В работе [1] были измерены индуцированное светом необратимое высвобождение и поглощение протонов ацетилированным и не модифицированным BR. При нейтральном и щелочном pH наблюдается высвобождение ионов, при кислом pH — поглощение. В присутствии высоких концентраций гуанидин-гидрохлорида свет вызывал только высвобождение протонов (даже при низких pH). Также не наблюдалось захвата или высвобождения протонов при освещении [1]. Время жизни 410-нм-промежуточной конформации BR заметно увеличилось при добавлении высокой концентрации гуанидин-гидрохлорида [2]. Спектры кругового дихроизма при низкой температуре в присутствии гуанидин-гидрохлорида показали, что вторичная структура белка в интермедиате-410-нм не изменилась по сравнению с комплексом в пурпурных мембранах, но состояние ароматических аминокислотных остатков, а также хромофора ретиналя, существенно отличались друг от друга [3].

В нашей работе методом лазерной время-разрешенной спектроскопии изучалась кинетика раствора пурпурных мембран BR из археи *Halobacterium salinarum*. Мембраны находились в буфере либо без, либо с присутствием 100 мМ гуанидин-гидрохлорида. После импульсного воздействия лазера на образец следили за кинетикой интенсивности поглощения. Получены данные об удлинении фотоцикла BR при добавлении гуанидин-гидрохлорида с 30 мс до 30 с.

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

Литература

1. Takeuchi Y, Ohno K, Yoshida M, Nagano K. Light-induced proton dissociation and association in bacteriorhodopsin // Photochemistry and Photobiology. 1987. V. 33. P. 587-592
2. Yoshida M, Ohno K, Takeuchi Y, Kagawa Y. Prolonged lifetime of the 410-nm intermediate of bacteriorhodopsin in the presence of guanidine hydrochloride // Biochemical and Biophysical Research Communications. 1987. V. 75. No. 4. P. 1111-1116.
3. Yoshida M, Ohno K, Takeuchi Y. Altered activity of bacteriorhodopsin in high concentrations of guanidine hydrochloride // J. Biochem. 1987. V. 87. P. 491-495.

Изучение модифицированных вариантов термостабильного флуоресцентного белка CagFbFp

Н. Барит, О.Ю. Семёнов, В.В. Назаренко, А.Н. Юденко, А.А. Ремеева, И.Ю. Гуцин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Одним из популярных методов наблюдения за динамикой белков *in vivo* является сцепка целевого белка с флуоресцентным. Чаще всего в качестве флуоресцентных меток выступают белки семейства GFP (green fluorescent protein) [1]. Однако им свойственен ряд ограничений: невозможность применения в анаэробных условиях, продолжительное время созревания хромофора, а также сравнительно большие размеры (~25 кДа) [2]. Альтернативным вариантом, не имеющим перечисленных недостатков, могут служить флавин-связывающие флуоресцентные белки (FbFPs) на основе LOV (light-oxygen-voltage) доменов - повсеместно распространенных фотосенсорных модулей, обнаруженных в белках бактерий, архей и эукариот. Общим для всех белков LOV является чувствительный к синему свету флавиновый хромофор, который в сигнальном состоянии ковалентно связан с ядром белка через соседний остаток цистеина.

Предпринимаются различные попытки манипулирования свойствами LOV-доменов и одна из них – это работа над стабильностью. Модифицированные версии доменов LOV нашли широкое применение в флуоресцентной микроскопии и оптогенетике, при этом постоянно разрабатываются улучшенные версии. Поскольку последовательности и структуры доменов LOV в целом хорошо консервативны, эффекты описанных мутаций могут передаваться на другие белки, принадлежащие к этому семейству [3].

В данной работе изучались модифицированные варианты флуоресцентного белка CagFbFp на основе LOV-домена из термофильного микроорганизма *Chloroflexus aggregans* [4]. Были сделаны конструкции с заменами различных аминокислот пролины, и исследована их термостабильность.

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

Литература

1. Tsien R.Y. Constructing and Exploiting the Fluorescent Protein Paintbox (Nobel Lecture) // *Angewandte Chemie International Edition*. 2009. P. 5612–5626.
2. Drepper, Thomas, et al. Reporter proteins for in vivo fluorescence without oxygen // *Nature biotechnology*. 2007. P. 2006–2008.
3. Remeeva A.A. et al. Effects of Proline Substitutions on the Thermostable LOV Domain from *Chloroflexus aggregans* // *Crystals*. – 2019
4. Nazarenko V. V. et al. A thermostable flavin-based fluorescent protein from *Chloroflexus aggregans*: a framework for ultra-high resolution structural studies // *Photochemical & Photobiological Sciences*. – 2019

Изучение условий и механизмов димеризации АТФ-синтазы из хлоропластов *Spinacia Oleracea*

*Ю.Л. Рижиков¹, Д.П. Вертелецкий¹, А.В. Власов¹, С.Д. Осипов¹, М.Ю. Николаев^{1,2},
А.И. Куклин^{1,3}, В.И. Горделий^{1,2,4}*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Institute of Complex Systems (ICS-6)

³Объединённый институт ядерных исследований

⁴Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS

АТФ-синтаза – трансмембранный белковый комплекс, осуществляющий реакцию фосфорилирования аденозиндифосфата (АДФ) с последующим образованием аденозинтрифосфата (АТФ) при использовании энергии протонов, проходящих по электрохимическому градиенту. Данный механизм синтеза АТФ универсален для всех исследованных живых организмов.

В некоторых живых организмах АТФ-синтаза существует в олигомерном состоянии и таким образом может изменять структуру органелл, в мембранах которых она представлена. Так, в работе [1] было показано, что F_1F_0 АТФ-синтаза из дрожжей образует димеры, которые помогают образованию крист митохондрий. В работе [2] методом криоэлектронной микроскопии в митохондриях млекопитающих были обнаружены тетрамеры АТФ-синтазы. Для АТФ-синтазы из хлоропластов хламидомонады также было продемонстрировано образование димеров [3], однако не было получено информации о взаимном расположении белков в димере, поэтому вопрос о влиянии димеров АТФ-синтазы на структурообразование мембран хлоропластов остаётся открытым.

В настоящей работе с помощью метода малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) проводились исследования структуры и олигомерного состояния CF_0F_1 АТФ-синтазы из хлоропластов *Spinacia Oleracea* (шпинат огородный), солюбилизированной в детергенте tRCC- α -M. МУРР измерения осуществлялись на установке Rigaku (МФТИ НИУ, Долгопрудный, Россия). На основании полученных малоугловых данных для образцов АТФ-синтазы, соответствующих буферам с различной концентрацией соли, с помощью программного пакета ATSAS [4] были рассчитаны процентные соотношения мономер/димер. Было показано, что при 250 mM NaCl белок находится преимущественно в форме мономера. Теоретическая кривая малоуглового рассеяния, рассчитанная с использованием атомарной структуры (PDB код: 6FKF), надёжно аппроксимирует экспериментальные данные ($\chi^2 = 1.0$), что свидетельствует о субъединичной целостности мономера АТФ-синтазы. Также в работе с помощью программы CORAL [5] программного пакета ATSAS была получена модель димера АТФ-синтазы, которая с хорошей точностью ($\chi^2 = 1.3$) аппроксимирует МУРР данные, полученные при 150 mM NaCl.

Полученная модель димера соответствует одной из двух предложенных в работе [6] моделей димера, а именно той, в которой мембранные части мономеров в димере разнонаправлены. Это подтверждает агрегационный характер олигомеризации АТФ-синтазы из хлоропластов. Результат данной работы объясняет результаты предыдущих работ [7][8], в которых наблюдалось образование димеров при реконституции АТФ-синтазы в нанодиски. Как показано в настоящей работе, понижение концентрации NaCl ниже 250 mM ведёт к димерообразованию, а стандартный протокол реконституции мембранных белков в нанодиски предполагает использование буфера с концентрацией NaCl 100 mM [9]. Таким образом, в будущих структурных исследованиях, сопряжённых с использованием нанодисков, наряду с оптимизацией белок/липидного соотношения необходимо оптимизировать параметры буфера, такие как ионную силу, солевой состав, pH и т.д. Этот вывод может быть обобщён на большинство мембранных белков.

Работа выполняется при поддержке РФФИ (грант № 18-34-00256\19).

Литература

1. Davies K.M., Anselmi C., Wittig I., Faraldo-Gómez J. D., Kühlbrandt W. Structure of the yeast F_1F_0 -ATP synthase dimer and its role in shaping the mitochondrial cristae. – PNAS. – 2012, 109(34), с. 13602–13607.
2. Gu J., Zhang L., Zong S., Guo R., Liu T., Yi J., Wang P., Zhuo W., Yang M. Cryo-EM structure of the mammalian ATP synthase tetramer bound with inhibitory protein IF1. – Science. – 2019, 364(6445), с. 1068–1075.
3. Rexroth S., Meyer zu Tittingdorf J.M., Schwassmann H.J., Krause F., Seelert H., Dencher N.A. Dimeric H^+ -ATP synthase in the chloroplast of *Chlamydomonas reinhardtii*. – Biochim. Biophys. Acta. – 2004, 1658(3), с. 202–211.
4. Franke D., Petoukhov M. V., Konarev P. V., Panjkovich A., Tuukkanen A., Mertens H. D. T., Kikhney A. G., Hajizadeh N. R., Franklin J. M., Jeffries C. M., Svergun D. I. ATSAS 2.8: a comprehensive data analysis suite for small-angle scattering from macromolecular solutions. – J. Appl. Cryst. – 50 (2017), 1212–1225
5. Petoukhov M. V. [et al.] New developments in the ATSAS program package for small-angle scattering data analysis. – J. Appl. Cryst. – 2012, 45, с. 342–350.
6. Böttcher B., Gräber P. The structure of the H^+ -ATP synthase from chloroplasts and its subcomplexes as revealed by electron microscopy. – Biochim. Biophys. Acta. – 1458 (2000) 404–416.
7. Рижиков Ю. Л., Власов А. В., Николаев М. Ю., Вертелецкий Д. П., Куклин А. И., Горделий В. И. Димеризация АТФ-синтазы в нанодисках. – Труды 62-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 18 – 24 ноября 2019 года. Фундаментальная и прикладная физика. – М.: МФТИ, 2019, 128.
8. Pernot P. [et al.] Upgraded ESRF BM29 beamline for SAXS on macromolecules in solution. – J. Synchrotron Radiat. – 2013, 20, с. 660–664.
9. Vlasov A. V., Ryzhykau Yu. L., Gordeliy V. I., Kuklin A. I. Spinach ATP-synthases form dimers in nanodiscs. Small-angle X-ray and neutron scattering investigations. – The FEBS Journal 284 (Suppl. 1) – (2017) 70–99.
10. Ritchie T. K., Grinkova Y. V., Bayburt T. H., Denisov I. G., Zolnerjckis J. K., Atkins W. M., Sligar S. G. Chapter 11 – Reconstitution of membrane proteins in phospholipid bilayer nanodiscs. – Methods Enzymol. – 2009, 464, 211–31.

Исследование структурных изменений в липидных бислоях в присутствии двухвалентных катионов металлов

С.А. Куракин^{1,2}, Е.В. Ермакова², А.И. Иваньков^{2,3,4}, Н. Кучерка^{2,5}

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет

²Объединенный институт ядерных исследований

³Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

⁴Институт проблем безопасности атомных электростанций национальной академии наук Украины

⁵Faculty of Pharmacy, Comenius University in Bratislava

Ионы металлов, содержащиеся в цитоплазме и межклеточной среде, играют важные роли в жизнедеятельности клетки как автономной единицы, поскольку способствуют регуляции поляризации клеток, возникновению потенциалов действия, а также обеспечивают структурную и функциональную целостность мембраны [1, 2]. Многие катионы металлов электростатически связываются с головными группами липидов и оказывают влияние на структуру липидного бислоя, которая, в свою очередь, напрямую затрагивает не только функциональность мембраны в целом, но также структурную организацию и функции белков и пептидов, интегрированных в нее [3]. При этом механизмы взаимодействия на молекулярном уровне даже для простых двухкомпонентных систем «липидный бислой – ион» на данный момент далеки от понимания.

В данной работе методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) на однослойных везикулах были исследованы структурные изменения цвиттер-ионных фосфолипидных бислоев насыщенного 1,2-димиристоил-*sn*-глицеро-3-фосфохолина (ДМФХ) при добавлении ионов Ca^{2+} , Mg^{2+} и Co^{2+} в диапазоне концентраций 0 – 30 мМ. Были получены структурные параметры липидных бислоев (толщина и площадь на липид) при различных концентрациях катионов в гель- и жидкокристаллической (ЖК) фазах липидных систем. Например, при добавлении Ca^{2+} в концентрации 0–1 мМ наблюдается увеличение толщины липидного бислоя на 1,9 Å и 2,9 Å в ЖК- и гель- фазах соответственно; затем наблюдается слабая тенденция к уменьшению толщины бислоя в ЖК-фазе (рис. 1(А)). Однако в случае ионов Co^{2+} все изменения слабые (рис. 1(В)). Тем не менее, обнаруженное влияние ионов на структуру липидного бислоя подтверждает прямое взаимодействие между ионами и липидами.

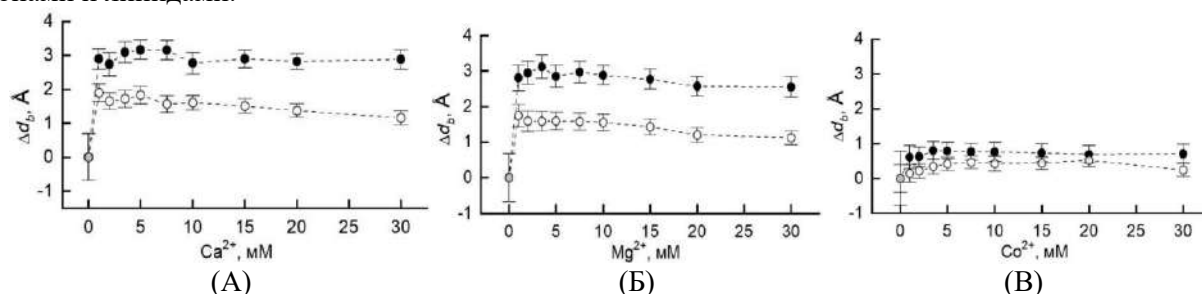


Рис. 1. Графики изменения толщины липидного бислоя ДМФХ в зависимости от концентрации ионов (А) Ca^{2+} , (Б) Mg^{2+} , (В) Co^{2+} . Зависимости получены для липидных систем в ЖК- (○) и гель- (●) фазах.

На основе этих экспериментальных данных была дополнена и расширена ранее разработанная модель липид-ионных взаимодействий для систем с насыщенными фосфолипидами. А именно, за счет связывания иона с мембраной электрическое поле реорганизует P^-N^+ диполь полярной головной группы фосфолипида, ориентируя его вдоль нормали бислоя, что сопровождается образованием ионных мостиков (липид-ион-липид) (рис. 2). Это приводит к увеличению толщины бислоя и образованию более плотной упаковки мембраны с уменьшенной площадью на липид за счет электростатического притяжения липидов к иону. Дальнейшее увеличение концентрации ионов в данном случае приводит к насыщению изменений структуры липидного бислоя, которое вероятнее всего обусловлено возникающими пространственными ограничениями для фосфолипидов, не позволяющими дальнейшее сжатие бислоя в латеральном направлении. Одновременно с этим избыточное латеральное давление в гидрофобной части липидного бислоя [4] может приводить к наклону молекул фосфолипидов относительно нормали бислоя, тем самым уменьшая его толщину.

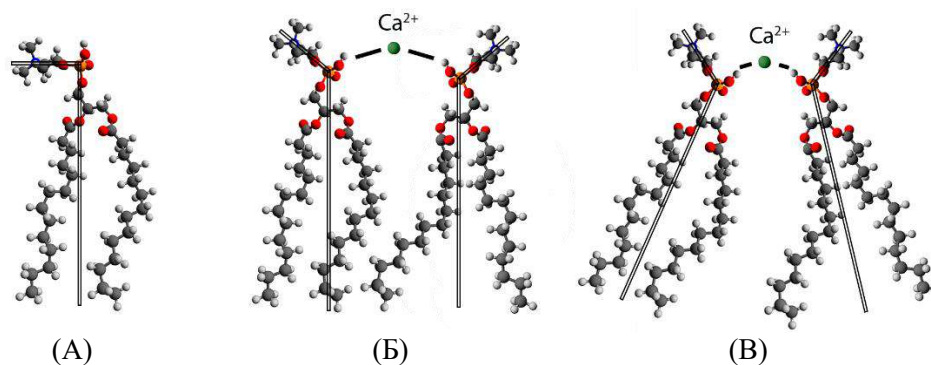


Рис. 2. Графическая интерпретация эффекта изменения толщины липидного бислоя в везикулах ДМФХ, находящихся в растворе, содержащем ионы Ca^{2+} (Mg^{2+}). (А) Молекула ДМФХ (прямыми линиями представлена огрубленная модель молекулы); (Б) Формирование ионного мостика $\text{PO}_4^- - \text{Ca}^{2+} - \text{PO}_4^-$ вследствие притяжения отрицательно заряженных групп соседних молекул к иону, а также изменение конформации головы фосфолипидов; (В) Наклон молекул фосфолипидов относительно нормали бислоя, приводящий к постепенному уменьшению толщины бислоя. Цветами обозначены: водород (белый), углерод (серый), кислород (красный), фосфор (оранжевый), азот (синий), ион кальция (зеленый)

Предлагаемая модель взаимодействия через ионные мостики тесно коррелирует с плотностью заряда ионов на поверхности бислоя ДМФХ и характерными средними расстояниями между фосфолипидами в мембране, которые в данном случае действительно сопоставимы с рассчитанными нами длинами экранирования Дебая для ионов, а режим взаимодействия липид-ион-липид подтверждается исследованными нами системами ДПФХ + Ca^{2+} (и Mg^{2+}) (в отличие от систем ди-мононенасыщенного ДОФХ + Ca^{2+} (и Mg^{2+}), где формируются разделенные пары липид-ион). Кроме того, представленная модель интересна для исследования взаимодействий ионов с различными пептидами в мембране (например, амилоид- β пептиды и антимикробные пептиды).

В заключение добавим, что катионы Co^{2+} незначительно влияют на структурные параметры бислоев ДМФХ. Это можно объяснить различной гидратацией, силой и местами связывания Co^{2+} с полярной головой фосфолипидов по сравнению с другими ионами [5]. Более того, в водных растворах Co^{2+} образует высокоспиновые комплексы с упорядоченным октаэдрическим расположением молекул воды [6], поскольку кобальт является переходным металлом. Это, вероятно, уменьшает силу связывания Co^{2+} с головными группами и, соответственно, ослабляет влияние Co^{2+} на толщину липидного бислоя.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 19-72-20186 и в рамках тематического плана ОИЯИ 04-4-1121-2015/2020.

Литература

1. Pabst G., Kučerka N., Nieh M.-P., Rheinstädter M.C., Katsaras J. Applications of neutron and X-ray scattering to the study of biologically relevant model membranes // *Chemistry and Physics of Lipids*. 2010. V. 163. P. 460.
2. Alberts B., Johnson A., Lewis J., Morgan D., Raff M., Roberts K., Walter P. *Molecular Biology of the Cell*. 6th edition. Garland Science, 2015. 1465 p.
3. Lee A. How lipids affect the activities of integral membrane proteins // *Biochimica et Biophysica Acta*. 2004. V. 1666. P. 62
4. Huster D., Paasche G., Dietrich U., Zschörnig O., Gutberlet T., Gawrisch K., Arnold K. Investigation of Phospholipid Area Compression Induced by Calcium Mediated Dextran Sulfate Interaction // *Biophysical Journal*. 1999. V.77. P.879.
5. Kučerka N., Dushanov E., Kholmurodov K.T., Katsaras J., Uhríková D. Calcium and Zinc Differentially Affect the Structure of Lipid Membranes // *Langmuir*. 2017. V. 33. P. 3134
6. Ohtaki H., Yamatera H. *Structure and Dynamics of Solutions*. Elsevier: Science & Technology, Oxford, United Kingdom, 1992. 350 p.

Исследование структуры комплекса цитохрома P450

**И.А. Капранов¹, С.С. Бухдрукер¹, Т.С. Варакса², Е.В. Марьин¹, А.А. Ковалевский²,
И.П. Грабовец², А. Гилеп², Н.В. Струшкевич³, В.И. Борщевский¹**

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт биоорганической химии НАН Беларуси

³Сколковский институт науки и технологий

Цитохромы семейства P450 обнаружены в большинстве организмов, где участвуют в обмене и синтезе стероидов, желчных кислот, ненасыщенных жирных кислот, фенольных метаболитов, а также нейтрализации чужеродных химических веществ [1]. Было показано, что противогрибковые препараты, нацеленные на цитохромы P450, подавляют рост *Mycobacterium tuberculosis*, возбудителя одного из самых смертоносных заболеваний – туберкулёза [2]. Для работы цитохромов необходимы белки-партнёры [3]. Таким образом ингибирование образования комплекса цитохрома P450 с партнёром может стать перспективной стратегией для разработки новых противотуберкулёзных препаратов.

В данной работе была получена кристаллическая структура комплекса микобактериального цитохрома P450, сшитого через линкерную последовательность в одну полипептидную цепь с предполагаемым белком-партнером. Кристаллы комплекса давали дифракцию до разрешения 1.6 Å, что позволило однозначно определить координаты атомов белков-партнеров, а также каталитически важных молекул воды в активном сайте. Высокое качество карт электронных плотностей позволили построить боковые группы белков на поверхности контакта, что дает структурный базис образования комплекса и предложить способы его дестабилизации при создании противотуберкулёзных препаратов.

Данная работа была поддержана совместным исследовательским грантом Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (Б20Р-061) и Российского фонда фундаментальных исследований (20-54-00005). Выражаем благодарность Государственного задания РФ (соглашение №075-00337-20-03, проект FSMG -2020-0003).

Литература

1. Denisov I.G. [и др.]. Structure and Chemistry of Cytochrome P450 // Chemical Reviews. 2005. № 6 (105). С. 2253–2278.
2. Ortega Ugalde S. [и др.]. Function, essentiality, and expression of cytochrome P450 enzymes and their cognate redox partners in *Mycobacterium tuberculosis*: are they drug targets? // Applied Microbiology and Biotechnology. 2019. Т. 103. № 9. 3597–3614 с.
3. Schlichting I. [и др.]. The catalytic pathway of cytochrome P450cam at atomic resolution // Science. 2000. № 5458 (287). С. 1615–1622.

Structural study of oncogenic mutation of a G-protein coupled receptor

A. Koriazhkina¹, A. Gusach¹, A. Luginina¹, A. Mishin¹

¹Research Center for Molecular Mechanisms of Aging and Age-Related Diseases, Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University)

G-protein coupled receptors (GPCRs) constitute a large protein superfamily, which accounts for 4% of the entire human protein-coding genome [1]. GPCRs are presented in almost all the tissues and organs, and their malfunctions lead to a wide range of pathological states [2]. In particular, GPCRs are among the most commonly mutated genes in cancer, and related somatic mutations are found in 20% of tumor samples [3]. One of those mutant genes encodes a GPCR, which carries a single amino acid substitution and serves as a driver oncogene in uveal melanoma as well as in some other tumors [4,5]. Uveal melanoma is the most common intraocular malignancy, which is associated with a high rate of metastasis with a short survival time for patients [6]. It is supposed that the described amino acid substitution stabilizes the active state and destabilizes the inactive state of the GPCR. Furthermore, the mutant receptor displays signaling bias and avoids arrestin-mediated downregulation [7]. Structural studies of the described GPCR

mutant will reveal some important peculiarities of the mechanisms of the tumor onset. Furthermore, high-resolution structures of this receptor can be used for the structure-based drug design, which is a great instrument for the production of compounds with enhanced effectiveness and minimized adverse effects [8].

GPCRs expression, extraction, purification, stabilization, and crystallization remain very challenging nowadays, so the very first task of our research is a screening of point mutations, which would enhance target receptor expression, stability, monodispersity, etc. At the same time, these mutations should not interact with functionally relevant regions of GPCR, which are associated with its oncogenic activity. Later on, optimization of purification protocols and crystallization conditions screening are necessary.

In this report we describe recent process in the mutant structure determination project. The results of this study will facilitate the development of the therapies against uveal melanoma as well as some other malignancies. The structural model of the described constitutively active mutant will also give some valuable insights into carcinogenesis mechanisms associated with GPCRs.

This work was supported by the State Task of the Russian Federation (agreement No. 075-00337-20-03, project FSMG -2020-0003).

Literature

1. Foord S.M. [et al.] International Union of Pharmacology. XLVI. G protein-coupled receptor list Pharmacological Reviews. 2005. Vol. 57, № 2. P. 279–288.
2. Hu G.M., Mai T.L., Chen C.M. Visualizing the GPCR Network: Classification and Evolution // Scientific Reports. Springer US, 2017. Vol. 7, № 1. P. 1–15.
3. Prickett T.D. [et al.] Exon capture analysis of G protein-coupled receptors identifies activating mutations in GRM3 in melanoma // Nature Genetics. NIH Public Access, 2011. Vol. 43, № 11. P. 1119–1126.
4. van de Nes J.A.P. [et al.] Activating CYSLTR2 and PLCB4 Mutations in Primary Leptomenigeal Melanocytic Tumors // Journal of Investigative Dermatology. Elsevier B.V., 2017. Vol. 137, № 9. P. 2033–2035.
5. Küsters-Vandeveld H.V.N. [et al.] Whole-exome sequencing of a meningeal melanocytic tumour reveals activating CYSLTR2 and EIF1AX hotspot mutations and similarities to uveal melanoma // Brain Tumor Pathology. Springer, 2018. Vol. 35, № 2. P. 127–130.
6. Spagnolo F., Caltabiano G., Queirolo P. Uveal melanoma // Cancer Treatment Reviews. Elsevier, 2012. Vol. 38, № 5. P. 549–553.
7. Ceraudo E. [et al.] Uveal Melanoma Oncogene CYSLTR2 Encodes a Constitutively Active GPCR Highly Biased Toward Gq Signaling // bioRxiv. Cold Spring Harbor Laboratory, 2019. P. 663153.
8. Congreve M., Borshel N., Papp T. Valuation benefits of structure-enabled drug discovery // Nat Rev Drug Discov. 2011. Vol. 10, № March. P. 2.

УДК 577.345 + 535.012

Исследование флуоресцентных белков методом двухфотонной поляризационной микроскопии

А. А. Царенко¹, Э. Йованович², Й. Лазар³

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Белградский университет

³ Центр нанобиологии и структурной биологии/Институт органической химии и биохимия

Многие молекулярные процессы, происходящие в живых клетках, можно визуализировать используя генетически закодированные флуоресцентные белки. Большинство молекул флуоресцентных белков имеют анизотропные оптические свойства, наблюдая которые можно делать выводы об их пространственной ориентации. Важным способом визуализации молекулярных процессов с использованием флуоресцентных белков является двухфотонная поляризационная микроскопия (*Two-photon polarization microscopy*, 2PPM). Однако, помимо простого наблюдения изменения распределения ориентаций флуоресцентных молекул, 2PPM позволяет количественно определить распределение ориентаций молекул.

В случае однофотонного электронного возбуждения (*One-photon excitation*, 1PE) свойства поглощения молекулы характеризуются вектором, называемым дипольный момент перехода (TDM). Скорость поглощения света пропорциональна $\cos^2 \alpha$, где α – угол между вектором электрического поля (поляризацией) пучка и вектором дипольного момента перехода. Свойства поглощения при двухфотонном электронном возбуждении (*Two-photon excitation*, 2PE) характеризуются тензором двухфотонного поглощения S.

$F = A (\mu^T \cdot S \cdot \mu)^2$, где μ – вектор электрического поля возбуждающего света, S – тензор двухфотонного поглощения.

Однако для некоторых молекул в случае 2Р возбуждения можно использовать упрощенную векторную интерпретацию, тогда скорость поглощения света пропорциональна $\cos^4 \alpha$.

В данной работе исследовались анизотропные свойства красных флуоресцентных белков (*Red Fluorescent Proteins*, RFP), на примере кристаллов mCherry.

Была измерена и проанализирована флуоресценция выделенного и кристаллизованного белка mCherry на длинах волн возбуждающего света 700 и 1020 нм, а также проведена интерпретация полученных экспериментальных данных с помощью упрощенного векторного и тензорного описания значений флуоресценции для 2Р поглощения.

В ходе работы были сделаны следующие выводы:

- 1) mCherry демонстрирует различную направленность 2Р поглощения при 700 и 1020 нм
- 2) Оптические свойства при 1020 нм могут быть аппроксимированы вектором
- 3) Оптические свойства при 700 нм не могут быть описаны вектором.
- 4) Определено несколько элементов тензора поглощения mCherry при 700 нм.

Литература

1. Chalfie M., Tu Y., Euskirchen G., Ward W and Prasher D.C., Green fluorescent protein as a marker for gene expression, *Science*, 263(5148), 802-805, (1994)
2. Drobizhev M., Tillo S., Makarov N.S., Hughes T.E. and Rebane A., Absolute Two-Photon Absorption Spectra and Two-Photon Brightness of Orange and Red Fluorescent Proteins, *The Journal of Physical Chemistry B*, 113, 855-859, (2009)
3. Lazar J., Bondar A., Timr S., Firestein S.J., Two-photon polarization microscopy reveals protein structure and function, *Nature Methods* 8: 684-690, (2011)
4. Bondar A., Lazar J., Dissociated GαGTP and Gβγ Subunits are the Major Activated Form of Heterotrimeric Gi/o Proteins. *The Journal of biological chemistry*. 289, 10.1074/jbc.M113.493643, (2013)

УДК 577.22

Исследования вариантов термостабильного флавин-связывающего флуоресцентного белка на основе LOV-домена из термофильной бактерии *Chloroflexus aggregans*

О.Ю. Семенов¹, Н. Барит¹, В.В. Назаренко¹, А.Н. Юденко¹, А.А. Ремеева¹, И.Ю. Гуцин¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Флавин-связывающие флуоресцентные белки (FbFPs) – это флуоресцентные белки, происходящие из семейства LOV (Light Oxygen Voltage)-доменов растений, бактерий и грибов. Они используют флавиномононуклеотид (FMN) в качестве хромофора и отвечают за чувствительность организмов к голубому свету. К их преимуществам можно отнести небольшой размер ~12–16 кДа, способность флуоресцировать в анаэробных условиях и быструю кинетику сборки [1].

Ранее в нашей лаборатории был разработан термостабильный белок CagFbFP из LOV-домена растворимой гистидин киназы термофильной бактерии *Chloroflexus aggregans* и получена его пространственная структура высокого разрешения [2]. Было продемонстрировано, что консервативный глутамин активного центра может с равной вероятностью занимать как классическое для большинства LOV-доменов положение, так и отличное от него, наблюдавшееся ранее для другого белка семейства [3]. Положение данного глутамина, вероятно, зависит от ближайшего аминокислотного остатка (в CagFbFP это изолейцин в позиции 52, а во многих других LOV доменах - валин или треонин). Линейка белков, состоящая из CagFbFP и его мутированных вариантов с заменой Ile52 на Val и Thr, представляет все типы активных центров, наблюдаемых в известных LOV доменах. Целью данной работы является получение пространственных структур и определение структурных изменений во всех вышеперечисленных вариантах белка CagFbFP, как для темного состояния, так и при облучении синим светом и рентгеновскими лучами.

На основе генетической конструкции белка CagFbFP были созданы генетические конструкции, кодирующие вышеописанные мутированные варианты белка. Были произведены препараты модифицированных белков высокой степени чистоты, исследованы их спектральные свойства и

термостабильность. Исследования последней показали, что рассмотренные мутированные варианты почти так же стабильны, как и CagFbFP, с разницей в температуре плавления менее 1,5 градусов. Все изучаемые белки с мутациями были успешно закристаллизованы, полученные кристаллы будут использованы для проведения рентгеноструктурного анализа.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 20-34-70109).

Литература

1. Wingen Marcus et al. The photophysics of LOV-based fluorescent proteins – new tools for cell biology // Photochemical & Photobiological Sciences. 2014. V. 13. P. 875-883.
2. V. V. Nazarenko et al. Thermostable flavin-based fluorescent protein from Chloroflexus aggregans: a framework for ultra-high resolution structural studies // Photochem. Photobiol. Sci. 2019. P. 1793-1805.
3. A. Pudasaini et al. Kinetics of the LOV domain of ZEITLUPE determine its circadian function in Arabidopsis // eLife, vol. 6, p. e21646, Feb. 2017.

УДК 577.322.9

Клонирование luxA, luxE и luxC генов lux-оперона Photorhabdus luminescens

Р.Н. Аль Ибрахим¹, М.Н. Коноплева¹, И.В. Манухов¹

¹Московский Физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Биолюминесценция относится к производству света живыми организмами. На молекулярном уровне биолюминесценция обеспечивается за счет каскада химических реакций, катализируемых ферментами, кодируемыми генами luxCDABEG. Гены luxA и luxB кодируют α - и β -субъединицы, соответственно, фермента люциферазы, продуцирующего светоизлучающие частицы. Гены luxC, luxD и luxE кодируют комплекс редуктазы жирных кислот [1], ответственный за синтез длинноцепочечного альдегидного субстрата, а luxG кодирует флавинредуктазу [2]. Количество доступных кристаллических структур ограничено LuxA, LuxB и LuxD белками (*Vibrio harveyi*) и LuxF (*Photobacterium leiognathi*). Целью данного исследования является анализ кристаллической структуры LuxA и LuxE (*Photorhabdus luminescens*). Белки, кодируемые генами lux-оперона *P. luminescens* более термостабильны, чем у *V. harveyi* и *P. leiognathi*. Поэтому представляет интерес получить их структуры для поиска структурных детерминант повышенной термостабильности бактериальных люцифераз.

Фрагменты luxA (1098 п.н.), luxE (1188 п.н.) и luxC (1491 п.н.) были амплифицированы с использованием в качестве матрицы плазмиды pXen7, которая содержит хромосомный фрагмент бактерий *P. luminescens*, содержащий lux-оперон (7000 п.н.) [3] и праймеров luxADir/Rev, luxEDir/Rev и luxCDir/Rev для фрагментов luxA, luxE и luxC соответственно (Табл. 1), структура праймеров содержит сайты рестрикции BamH1 и NcoI, необходимые для дальнейшего клонирования в экспрессивном векторе pET15b, а также последовательность 6 His для очистки экспрессированного белка на колонке.

Праймер	Последовательность, от 5' к 3'.
luxADir	GCCATGGGCCATCATCATCATCACAGCGGCAGCGGCATGAAATTTGGA AACTTTTTCCTTAC
luxARev	GCTGGATCCTTAGCTACTATAATAGCGAAC
luxEDir	GCCATGGGCCATCATCATCATCACAGCGGCAGCGGCATGACTTCATATG TTGATAACAAGAG
luxERev	GTTGGATCCGCGATGCATCTTAAATCCATAG
luxCDir	GCCATGGGCCATCATCATCATCACAGCGGCAGCGGCATGACTAAAAAA ATTTCATTTCATTATTAAC
luxCRev	GTCGGATCCTTTTACCTATTACGGGACAAATAC
pJET1.2Dir	CCTCACTATAGGGAGAGCGGC
pJET1.2Rev	AAGAACATCGATTTTCCATGGCAG

Табл.1. Праймеры, использованные для клонирования генов и анализа клонов.

Затем фрагменты ДНК, содержащие гены luxA, luxE и luxC были лигированы с вектором pJET1.2 (2974 п.н.), который позволяет эффективно клонировать продукты ПЦР с тупыми концами и содержит ген устойчивости к ампициллину. Клетки TG1 были трансформированы продуктами

лигирования *luxA*, *luxE* и *luxC* генов с использованием CaCl_2 метода. Наличие представляющих интерес фрагментов ДНК (вставок) в векторе проверялось с помощью реакции ПЦР непосредственно с растущих колоний с использованием универсальных праймеров pJET1.2Dir/Rev (табл. 1). Плазмиды, выделенные из отобранных по наличию вставки клонов, после проведения реакции ПЦР в качестве этапа подтверждения, получили названия pJET1.2-*luxA*, pJET1.2-*luxE* и pJET1.2-*luxC*. Верификация клонированных фрагментов проводилась с помощью секвенирования по Сэнгеру [4].

После добавления деканала 0,1% к суспензии бактерий с плазмидой pJET1.2-*luxA* отмечена люминесцентная реакция. Уровень люминесценции невысок, но отличим от фона. По-видимому, экспрессия белка LuxA слабая и для её увеличения требуется переклонирование под более сильный промотор. В дальнейшем планируется провести клонирование генов *luxA*, *luxE* и *luxC* в экспрессионном векторе pET-15b (5708 п.н.) под контролем промотора фага T7 с последующим биосинтезом целевых белков, их выделением и очисткой.

Литература

1. Meighen EA. Bacterial bioluminescence: organization, regulation, and application of the lux genes // FASEB J. 1993. V. 7. P. 1016-1022.
2. Brodl E. et al. Molecular Mechanisms of Bacterial Bioluminescence // Computational and Structural Biotechnology journal. 2018. V. 16. P. 551-564.
3. Manukhov I.V. et al. Cloning and expression of the lux operon of *Photobacterium luminescens*, strain Zm1: The nucleotide sequence of luxAB genes and basic characteristics of luciferase // Russ. J. Genet. 2000. V. 36. №. 3. P. 322-330.
4. Sanger F. et al. DNA sequencing with chain-terminating inhibitors // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 1977. V. 74. №. 12. P. 5463-5468.

УДК 579.258

Конструирование биосенсоров на основе грамположительных бактерий *Bacillus subtilis* 168

У.С. Новоятлова¹, И.В. Манухов¹, Е.Ю. Гнучих,² А.Г. Кессених¹

¹Московский Физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Государственный научно-исследовательский институт генетики и селекции промышленных микроорганизмов Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”,
Курчатовский Геномный Центр

Цельноклеточные бактериальные люминесцирующие биосенсоры - это культуры бактериальных клеток, специфически реагирующие на конкретные вещества или на различные виды стрессовых факторов, свечением. Lux-биосенсоры, сконструированные на основе грамотрицательных бактерий с использованием индуцируемых стрессовых промоторов, используются в том числе для измерения генотоксичности веществ и могут быть использованы для экологического мониторинга водоемов. [1] Для мониторинга загрязнения почвы биосенсоры на основе *Escherichia coli* малопригодны, с этой целью релевантно использовать биосенсоры на основе почвенных грамположительных бактерий, например, *Bacillus subtilis*. Ранее в работах [2], [3] были описаны конструкции для получения люминесцирующих грамположительных бактерий, но они не содержали индуцируемые промоторы и использовались в основном только для медицинских приложений. Целью данной работы является сконструировать lux-биосенсор на основе *B. subtilis* 168, используя нативные промоторы, селективно реагирующие на окислительный стресс и повреждения ДНК.

Для конструирования биосенсоров были отобраны и клонированы в клетках *E. coli* MG1655 следующие стрессовые промоторы *B. subtilis*: P_{dinC} , индуцируемый при повреждении ДНК [6], P_{alkA} , индуцируемый при алкилировании ДНК [8] и P_{ycgJ} , индуцируемый в присутствии перекиси водорода. Промотор P_{ycgJ} клонирован вместе с геном *oxyR*, который является регулятором. В качестве вектора была использована плаزمида pPL_ABCDEхеп содержащая в своём составе последовательность *luxABCDE* генов из *Photobacterium luminescens* с изменённым порядком генов и бациллярными рибосом-связывающими сайтами перед каждым геном [2]. Участки ДНК, содержащие целевые промоторы клонировались перед *luxABCDE* кассетой методом сборки по Гибсону [5].

Планируется дополнительно собрать биосенсорные конструкции с использованием следующих промоторов: P_{mrgA} , индуцируемый при окислительном стрессе [7] и P_{yneA} , индуцируемый как при SOS ответе, так и при окислительном стрессе [4].

Полученные штаммы MG1655 pNKoxyR, MC1061 pNKalkA и MC1061 pNKdinC были проверены на способность к биолюминесценции. Измерение люминесценции без и с добавлением субстрата (деканаль) в сравнении с MG1655 pPL_ABCDEхеп дало ожидаемо более высокий уровень индукции люминесценции.

В дальнейшем, планируется полученными плазмидами трансформировать клетки *B. subtilis* 168.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-34-70132

Литература

1. И. В. Манухов, Е. Д. Краснопеева, А. Г. Кессених, М. Н. Коноплева, Г. Б. Завильгельский, В. Ю. Котова, Е. Г. Смирнова, С. В. Гудков, С. Ф. Чалкин и Е. Н. Калиниченко, под редакцией Л. С. Ягузинского "О токсичности гептила", Редакционно-издательский отдел ИПХФ РАН, 2014.
2. E. Gnuchikh, A. Baranova, V. Schukina, I. Khaliullin, G. Zavilgelsky, and I. Manukhov, "Kinetics of the thermal inactivation and the refolding of bacterial luciferases in *Bacillus subtilis* and in *Escherichia coli* differ," *PLoS One*, vol. 14, no. 12, pp. 1–11, 2019, doi: 10.1371/journal.pone.0226576.
3. D. G. Deryabin, I. F. Karimov, I. V. Manukhov, N. A. Tolmacheva, and V. P. Balabanov, "Differential Analysis of Bactericidal Systems of Blood Serum with Recombinant Luminescent *Escherichia coli* and *Bacillus subtilis* Strains," vol. 154, no. 1, pp. 59–63, 2012.
4. Y. Kawai, S. Moriya, and N. Ogasawara, "Identification of a protein, YneA, responsible for cell division suppression during the SOS response in *Bacillus subtilis*," *Mol. Microbiol.*, vol. 47, no. 4, pp. 1113–1122, 2003, doi: 10.1046/j.1365-2958.2003.03360.x.
5. D. G. Gibson, L. Young, R. Y. Chuang, J. C. Venter, C. A. Hutchison, and H. O. Smith, "Enzymatic assembly of DNA molecules up to several hundred kilobases," *Nat. Methods*, vol. 6, no. 5, pp. 343–345, 2009, doi: 10.1038/nmeth.1318.
6. D. L. Cheo, K. W. Bayles, and R. E. Yasbin, "Cloning and characterization of DNA damage-inducible promoter regions from *Bacillus subtilis*," *J. Bacteriol.*, vol. 173, no. 5, pp. 1696–1703, 1991, doi: 10.1128/jb.173.5.1696-1703.1991.
7. L. Chen, L. Keramati, and J. D. Helmann, "Coordinate regulation of *Bacillus subtilis* peroxide stress genes by hydrogen peroxide and metal ions," *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, vol. 92, no. 18, pp. 8190–8194, 1995, doi: 10.1073/pnas.92.18.8190.
8. F. Morohoshi, K. Hayashi, and N. Munakata, "*Bacillus subtilis* alkA Gene Encoding Inducible 3-Methyladenine DNA Glycosylase Is Adjacent to the *ada* Operon," vol. 175, no. 18, pp. 6010–6017, 1993.

УДК 579.258

Конструирование цельноклеточного биосенсора на основе промотора *iscRSUA* оперона

В.В. Фомин¹, С.В. Баженов¹, И.В. Манухов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²ГосНИИ генетики и селекции промышленных микроорганизмов (ГосНИИгенетика)

Железосерные кластеры (Fe-S) представляют собой кофакторы белков, отвечающих за поддержание большого количества жизненно важных биологических процессов в клетках, таких как дыхание, фотосинтез, репарация ДНК и регуляция генной экспрессии. В клетках *Escherichia coli* основные белки, участвующие в регуляции количества Fe-S кластеров, кодируются *iscRSUA-hscBA-fd* (*isc*) опероном, включая ген *iscR*, который отвечает за синтез регуляторного белка. При изменениях количества Fe-S кластеров, например в условиях окислительного стресса, усиливается экспрессия генов под контролем промоторного участка *isc* оперона. Поэтому рассматриваемый механизм можно использовать для построения цельноклеточного биосенсора.

Ранее был сконструирован биосенсор *pDEW-iscRSUA* на основе промотора *isc* оперона. Такая плазмида была получена с использованием *pDEW201* [1] - беспромоторного вектора удобного для создания подобных конструкций из-за пониженного уровня шума и наличия генов люциферазы. Однако полученная плазмида оказалась неэффективной. Собранный биосенсор имеет низкую амплитуду по отношению к фоновому сигналу, что делает его непрактичным в применении. Поэтому

для улучшения качества построенной модели было предложено добавить ген-репрессор *iscR* в дополнение к промотору *isc* оперона для подавления шума.

В ходе работы был получен предложенный биосенсор *pDEW-iscR* путем клонирования промотора *isc* оперона вместе с геном *iscR*. Тем не менее, дальнейший анализ показал, что вставка гена *iscR* содержит мутацию ключевого аминокислотного остатка: вместо серина в 38-ом положении синтезируется глицин. В итоге уровень экспрессии двух собранных плазмид *pDEW-iscR* и *pDEW-iscRSUA* практически не отличается, что подтверждено проведенными экспериментами.

Для измерений использовали клетки *E. coli* MG1655, трансформированные описанными гибридными плазмидами *pDEW-iscR* и *pDEW-iscRSUA*. Клетки росли в жидкой среде LB до $OD_{600} \approx 0,1-0,2$, после чего были перенесены по 200 мкл в луночный планшет. При внесении перекиси водорода до конечных концентраций $10^{-2} - 10^{-8}$ М амплитуда ответа использованных плазмид составляла всего в 3-4 раза больше фонового сигнала. Поэтому в будущем планируется получить биосенсор без мутации ключевого аминокислотного остатка.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-34-70132 и Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение # 075-00337-20-03, проект FSMG-2020-0003).

Литература

1. Van Dyk T.K., Rosson R.A. Photorhabdus luminescens luxCDABE promoter probe vectors // Methods Mol. Biol. 1998. V. 102. P. 85–95.

УДК 577.22

Масс-спектрометрический анализ связывания лигандов с рецепторами, сопряженными с G-белком

О.А. Сухачева¹, А.Ю. Гусач¹, П.А. Хорн¹, А.П. Лугинина¹, И.В. Маслов¹, Е.А. Ляпина¹,
В.И. Борщевский¹, А.В. Мишин¹, В.Г. Черезов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²University of Southern California, Los Angeles

Рецепторы, сопряженные с G-белком (G-protein coupled receptors, GPCRs), представляют самое большое семейство мембранных белков генома человека, которые кодируются более чем 800 генами [1]. Нарушения в работе GPCRs приводят к широкому спектру заболеваний, таких как воспалительные и онкологические заболевания, неврологические расстройства, метаболический дисбаланс [2]. В настоящее время около трети всех лекарственных средств направлены на рецепторы, сопряженные с G-белком, поэтому они составляют самый большой класс лекарственных мишеней [3]. Таким образом, исследования аффинности связывания GPCRs с лигандами являются одними из самых востребованных и перспективных при выборе молекул в качестве кандидатов на лекарственные препараты. В данной работе мы изучаем лиганд-белковые взаимодействия с помощью метода масс-спектрометрии.

Масс-спектрометрия (МС) в настоящее время - один из самых распространенных методов изучения связывания молекул. МС широко используется в протеомике, медицине, метаболомике, химии и других областях. Данный метод отличается быстротой, чувствительностью, надежностью получаемой информации [4]. В данной работе мы исследуем специфическую стехиометрию связывания рецептор-лиганд: варьируя концентрацию лиганда и измеряя связанные фракции, можно количественно определить константу связывания лиганд-рецепторного комплекса.

Для стабилизации рецептора и создания окружения, наиболее близкого к нативному, мы используем мембранно-миметические системы - нанодиски и сравниваем их с классическим методом стабилизации мембранных белков в растворе – мицеллами.

В будущем этот подход может использоваться для высокопроизводительного скрининга лигандов для GPCR. Альтернативные методы скрининга - поверхностный плазмонный резонанс, изотермическая титрующая калориметрия - часто связаны с низкой пропускной способностью, высоким потреблением образца, ограничением динамического диапазона или необходимостью иммобилизации одного из партнеров по связыванию [5].

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 19-74-00088)

Литература

1. D. Zhang, Q. Zhao, and B. Wu Structural studies of G protein-coupled receptors // Mol. Cells. 2015
2. A. J. Venkatakrishnan, X. Deupi, G. Lebon, C. G. Tate, G. F. Schertler, and M. Madan Babu Molecular signatures of G-protein-coupled receptors // Nature. 2013
3. N. R. Latorraca, A. J. Venkatakrishnan, and R. O. Dror GPCR dynamics: Structures in motion // Chemical Reviews. 2017
4. B. Domon and R. Aebersold Mass spectrometry and protein analysis // Science. 2006
5. H. J. Maple et al. Automated protein-ligand interaction screening by mass spectrometry // J. Med. Chem. 2012

УДК 577.322.54

Методические особенности использования малоуглового рассеяния для структурных исследований мембранных белков на примере комплекса NpSRII/NpHtrII

Ю.Л. Рижиков^{1,2}, А.В. Власов^{1,2,3}, Ф.С. Орехов¹, М.И. Рулёв^{4,5,6},
В.И. Горделий^{1,5,6,7}, А.И. Куклин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт ядерных исследований

³Institute of Crystallography, RWTH Aachen University

⁴European Synchrotron Radiation Facility

⁵Institute of Biological Information Processing (IBI-7: Structural Biochemistry)

⁶JuStruct: Jülich Center for Structural Biology, Forschungszentrum Jülich

⁷Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat à l’Energie atomique et aux Energies Alternatives–CNRS

Мембранные белки играют жизненно важную роль в функционировании клеток, а также являются основными мишенями для лекарств. Структурная информация о белках является ключом к пониманию механизмов их функционирования и имеет решающее значение для разработки лекарств. Однако, получение структур мембранных белков с высоким разрешением, в частности, в нативных условиях, по-прежнему остается большой проблемой. В таких случаях методы малоуглового рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов (МУРР и МУРН) могут предоставить ценную структурную информацию [1].

Метод малоуглового рассеяния (МУР) может давать неоднозначную структурную информацию, если не принята во внимание априорная информация о белке. Одной из основных проблем анализа данных МУР для солюбилизованных мембранных белков является вклад детергентного пояса, окружающего трансмембранную часть белка. Проведён сравнительный анализ структур, получаемых при обработке данных МУРР и МУРН в двух случаях: когда наличие детергентного пояса учитывается в явном виде [2], а также в приближении однородного распределения рассеивающей плотности. Показано, что в случае использования данных нейтронного рассеяния модель однородной частицы применима с относительно хорошей точностью, в то время как в случае рентгеновского рассеяния получаемые структурные модели имеют явные артефакты, которые делают однородное приближение неприменимым. Анализ проведён на примере мембранного белкового комплекса сенсорного родопсина II (NpSRII) с его родственным трансдюсером (NpHtrII) из экстремофильных архей *Natronomonas pharaonis* [3].

Влияние полидисперсности и олигомеризации [4–6] комплекса NpSRII/NpHtrII – вторая проблема, которая была рассмотрена в настоящей работе. Показано, что неоднородность плотности длины рассеяния детергентного пояса, окружающей трансмембранную часть комплекса, а также полидисперсность, связанная с сосуществованием нескольких олигомерных состояний белка, существенно влияют на данные МУР и, следовательно, на получаемые из них трехмерные модели.

Описаны подходы, позволяющие учесть обе описанные выше проблемы для повышения качества структурной информации, получаемой при обработке данных МУР. Поскольку данные МУР обычно получают для солюбилизованных мембранных белков, а их олигомеризация является достаточно распространенным явлением, подходы, описанные в данной работе, могут быть использованы при исследовании других мембранных белков.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №20-54-12027.

Литература

1. Molodenskiy, D.S., Mertens, H.D.T., Svergun, D.I. An automated data processing and analysis pipeline for transmembrane proteins in detergent solutions // Sci. Rep. 2020. V. 10. P. 1–11.
2. Pérez, J., Koutsoubas, A. Memprot: a program to model the detergent corona around a membrane protein based on SEC-SAXS data // Acta Crystallogr. D. Biol. Crystallogr. 2015. V. 71. P. 86–93.
3. Gordeliy V.I. [et al.] Molecular basis of transmembrane signalling by sensory rhodopsin II–transducer complex // Nature. 2002. V. 419. P. 484–487.
4. Orekhov P.S. [et al.] Sensory Rhodopsin I and Sensory Rhodopsin II Form Trimers of Dimers in Complex with their Cognate Transducers // Photochem. Photobiol. 2017. V. 93. P. 796–804.
5. Budyak I.V. [et al.] Shape and oligomerization state of the cytoplasmic domain of the phototaxis transducer II from *Natronobacterium pharaonis* // PNAS. 2006. V. 103(42). P. 15428–15433.
6. Ryzhykau Yu.L. [et al.] High-resolution structural model of a sensor of two-component signaling system // Submitted to Sci. Rep. 2020.

УДК 577.322.54

Моделирование и предсказание структуры белков lux-оперона

С.В. Князева¹, М.Н. Коноплева¹, И.В. Манухов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²ФГБУ Государственный научно-исследовательский институт генетики и селекции промышленных микроорганизмов Национального исследовательского центра "Курчатовский институт" (ГосНИИГенетика)

Компьютерное моделирование наряду с экспериментальными методами являются основными и взаимодополняющими шагами в определении структуры и функций белков. Современные методы моделирования являются эффективным инструментом в молекулярной генетике, биоинженерии и др. Даже при отсутствии близких гомологов они позволяют с высокой точностью предсказывать свойства белка и, следовательно, облегчают проведение эксперимента.

В представленной работе проводится моделирование по гомологии белков lux-оперона, а также без гомологии, где она невозможна. Планируется провести мутагенез целевых генов для повышения термостабильности белков: люциферазы (LuxAB) из *Photorhabdus luminescence*, а также редуктазы жирных кислот LuxC, ацилтрансферазы LuxD и ацил-протеин синтетазы LuxE. К настоящему времени известны лишь структуры LuxAB [1] и LuxD (PDB 1THT) из *Vibrio harveyi* [2], а также проводилось моделирование белков комплекса LuxCDE [3].

Для решения поставленных задач в начале был проведен поиск всех имеющихся последовательностей, кодирующих белки – LuxA и LuxB – двух субъединиц бактериальной люциферазы, а также LuxC, LuxD и LuxE – субъединиц редуктазы, восстанавливающей субстрат люциферазной реакции тетрадеканаль, и эволюционно близких к ним белков в общедоступных базах данных. [4] Путем анализа и сравнения результатов разных программ (PyMol Python, ConSurf и др., а также интернет-ресурсы: I-Tasser, RaptorX, Swiss-Model) был проведен филогенетический анализ семейства белков с поиском схожей топологии. Моделирование по гомологии, проведенное для части исследуемых белков совместно с филогенетическим анализом и множественным выравниванием позволило предсказать трехмерную структуру белков, предсказать возможные энзиматические активности, а также строение активного центра, чтобы наметить мишени для сайт-направленного мутагенеза [5]. Для всех белков было проведено моделирование по семейству белков и наглядно продемонстрированы эволюционно сохраняющиеся элементы последовательности (Рис. 1). Таким образом предсказана трехмерная структура белков lux-оперона в более термостабильном состоянии.

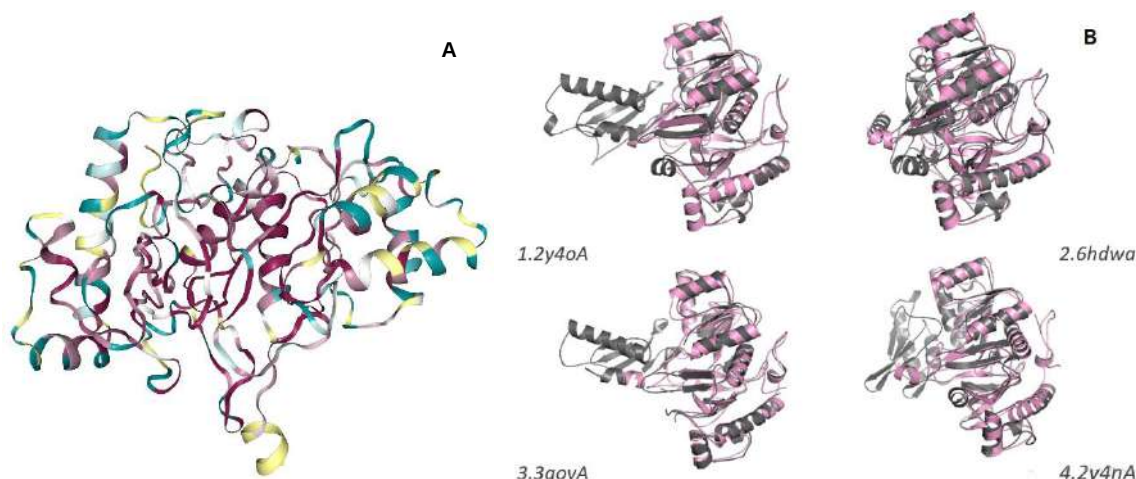


Рис. 1. **А.** Сохраняющиеся элементы структуры белка LuxE. Красным – консервативные последовательности, синим – менее консервативные. **В.** Выравнивание со структурными гомологами из банка структур PDB для построенной модели белка ацил-протеин синтетазы (LuxE). PDB-HIT отмечен серым, а модель целевого белка – розовым

Литература

1. Tanner JJ, Miller MD, Wilson KS, Tu SC, Krause KL Structure of bacterial luciferase beta 2 homodimer: implications for flavin binding// Biochemistry – 1997, 36 p.665-72
2. Lawson DM, Derewenda U, Serre L, Ferri S, Szittner R, Wei Y, Meighen EA, Derewenda ZS Structure of a myristoyl-ACP-specific thioesterase from *Vibrio harveyi* // Biochemistry
3. Brodl E., Winkler A. and Macheroux P. Molecular Mechanisms of Bacterial Bioluminescence. Comput. Struct. Biotechnol J., 2018. Vol. 16, pp. 551-564.
4. O'Leary N.A. [et al.]. Reference sequence (RefSeq) database at NCBI: current status, taxonomic expansion, and functional annotation // Nucleic Acids Research. 2015. T. 44. № D1. C. D733–D745.
5. Bast F. Sequence Similarity Search, Multiple Sequence Alignment, Model Selection, Distance Matrix and Phylogeny Reconstruction// Nature Protocol Exchange. 2013

УДК 577.29

Надёжный метод вычитания фона для данных рентгеновской дифракции

Е.В. Марьин, Д. Д. Вахрамеев, В.И. Борщевский

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Мембранные белки играют важную роль в передаче сигнала через клеточную мембрану во многих организмах [1-3]. В последнее время их структурные исследования стали более доступны благодаря прогрессу в их экспрессии, стабилизации и кристаллизации, наравне с вычислительными методами предсказания их стабильности, ускоряющими упомянутые шаги [4]. За прошедшее десятилетие, серийная фемтосекундная кристаллография (СФК) с использованием рентгеновских лазеров на свободных электронах (РЛСЭ) позволила определить структуры ранее труднодоступных структур [5] рецепторов, сопряжённых с G-белком (GPCR), открывая путь к рациональному дизайну лекарств и пониманию механизма активации GPCR [6]. При этом, определение структур мембранных белков, помимо экспериментальных сложностей, зачастую сопряжено с дополнительными сложностями при обработке данных: рассеяние от липидной фазы, которая является носителем микрорекристаллов [7], создаёт относительно большой фон, мешающий уверенному определению дифракционных интенсивностей. В нашей работе представляем новый метод обработки подобных данных, основанный на извлечении профиля шума из комплекса картин рентгеновской дифракции. Мы оцениваем улучшение данных для нескольких ранее собранных наборов фемтосекундной кристаллографии, включая неопубликованные данные рецептора, сопряжённого с G-белком. Наша работа показывает принципиальную возможность улучшения качества обработки данных рентгеновской путём вычитания профиля шума, извлечённого из множества дифракционных картин.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-29-12022.

Литература

1. Luginina A. и др. Structure-based mechanism of cysteinyl leukotriene receptor inhibition by antiasthmatic drugs // *Sci. Adv.* 2019. Т. 5. № 10. С. eaax2518.
2. Gusach A. и др. Structural basis of ligand selectivity and disease mutations in cysteinyl leukotriene receptors // *Nat. Commun.* 2019. Т. 10. № 1. С. 5573.
3. Kovalev K. и др. Molecular mechanism of light-driven sodium pumping // *Nat. Commun.* 2020.
4. Popov P. и др. Computational design of thermostabilizing point mutations for G protein-coupled receptors.
5. Katritch V., Cherezov V., Stevens R.C. Structure-Function of the G Protein-Coupled Receptor Superfamily // *Annu. Rev. Pharmacol. Toxicol.* 2013. Т. 53. № 1. С. 531–556.
6. Mishin A. и др. An outlook on serial femtosecond crystallography application in drug discovery // *Expert Opin. Drug Discov.* 2019. Т. 14. № 0. С. 1–13.
7. Weierstall U. Liquid sample delivery techniques for serial femtosecond crystallography. // *Philos. Trans. R. Soc. Lond. B. Biol. Sci.* 2014. Т. 369. № 1647. С. 20130337

УДК 53.086

Неинвазивный мониторинг динамики гибели клеток, индуцированной 5-аминолевулиновой кислотой, методом голографической томографии

Д.А. Горбенко^{1,2}, А.В. Белашов¹, Т.Н. Беляева³, И.К. Литвинов³, Е.С. Корнилова³,
И.В. Семёнова¹, О.С. Васютинский¹

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

²Университет ИТМО

³Институт цитологии РАН

В работе представлены результаты исследования реакции клеток эпителиальной карциномы человека HeLa на фотодинамическое воздействие с протопорфирином IX (PpIX). Как известно, экзогенная 5-аминолевулиновая кислота (5-ALA) усиливает синтез PpIX в митохондриях живых клеток. Исследование накопления PpIX и динамики гибели клеток актуально, поскольку использование флуоресцентной диагностики с 5-ALA в ходе операций при онкологических патологиях помогает достичь более полной резекции и, тем самым, увеличения выживаемости без прогрессирования заболеваний [1]. Однако, имеющаяся к настоящему времени информация о динамике генерации PpIX и реакции клеток различных опухолей на фотодинамическое воздействие, недостаточна [2]. Количественный анализ метаболизма 5-ALA в PpIX в клетках опухолей позволит улучшить методологию, используемую для локализации новообразований в ходе хирургического вмешательства.

В экспериментах индуцированная генерация PpIX оценивалась из интенсивности его внутриклеточной флуоресценции в красном диапазоне длин волн, измеренной с помощью конфокальной флуоресцентной микроскопии. Было определено относительное увеличение сигнала интегральной флуоресценции PpIX в клетках линии HeLa, и показано, что в культуре клеток *in vitro* оно составляет в среднем 63.2%. В ходе экспериментов были определены оптимальные параметры, приводящие к образованию максимального количества PpIX: доза 5-ALA и продолжительность инкубации.

С помощью цифровой голографической томографии изучена динамика гибели клеток эпителиальной карциномы человека HeLa и определены преобладающие механизмы гибели клеток при различной плотности потока излучения. Полученные внутриклеточные трехмерные распределения показателя преломления позволили определить набор клеточных параметров, включая объем клетки, площадь проекции и толщину. Статистический анализ этих морфологических параметров был выполнен для каждой дозы облучения и времени, прошедшего после облучения. Были оценены дозы облучения, приводящие к основным путям гибели клеток, апоптозу и некрозу. Результаты, полученные методом голографической томографии, были подтверждены с использованием стандартного теста АО/ЕВ на целостность клеточных мембран, проводимого с помощью конфокального флуоресцентного микроскопа.

Литература

1. J.C. Kennedy, R.H. Pottier. *J. Photochem.* // *Photobiolog. B: Biology* 1992, 4 (4), p. 275.
2. K. Mahmoudi, K.L. Garvey, A. Bouras, G. Cramer, H. Stepp, J.G. Jesu Raj, D. Bozec, T.M. Busch, C.G. Hadjipanayis. // *J. Neurooncol.* 2019, 141 (3), p.595.

Определение степени олигомеризации канального родопсина 2 методом флуоресцентной фотоактивируемой локализационной микроскопии

*Е.И. Бесценная, И.В. Маслов, А.О. Богородский, Ф.М. Цыбров, А.А. Алексеев,
В.И. Борщевский*

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Мембранные белки играют большую роль во множестве жизненно необходимых процессов. Знание структуры мембранных белков, включая степень олигомеризации, может дать представление о механизмах их работы. Чтобы делать более точные выводы о функционировании белка в живой клетке, необходимо определять его структурные характеристики в условиях, наиболее приближенных к естественным.

Методом, позволяющим исследовать мембранные белки непосредственно в клетке, является флуоресцентная микроскопия. Современные методы постановки экспериментов и обработки данных в этой области позволяют преодолеть классический дифракционный предел и детектировать сигналы от одиночных молекул. В данной работе для исследования олигомеризации канального родопсина 2 используется один из методов локализационной микроскопии одиночных молекул — флуоресцентная фотоактивируемая локализационная микроскопия (PALM, [1]).

Целевой белок исследования — канальный родопсин 2 (ChR2), светочувствительный трансмембранный семиспиральный белок, являющийся распространенным оптогенетическим инструментом. Для исследования его олигомерного состояния клетки нейробластомы человека трансфицировались плазмидой, содержащей химерные конструкции целевого белка с флуоресцентным белком-репортером. Данные PALM-микроскопии использовались для анализа статистики перехода белка-репортера в темновое состояние. Распределение количества миганий в белковых кластерах использовалось для определения степени олигомеризации [2].

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

Литература

1. Samuel T.Hess, Thanu P.K.Girirajan, Michael D.Mason Ultra-High Resolution Imaging by Fluorescence Photoactivation Localization Microscopy. // Biophysical Journal Volume 91, Issue 11, 1 December 2006, Pages 4258-4272
2. Carmen Kruger, Franziska Fricke, Christos Karathanasis, Marina S. Dietz, Sebastian Malkusch, Gerhard Hummer, Mike Heilemann Molecular counting of membrane receptor subunits with single-molecule localization microscopy. // Proceedings Volume 10071, Single Molecule Spectroscopy and Superresolution Imaging X; 100710K, 2017

Оптогенетический контроль мембранного потенциала митохондрий клеток НЕК293Т, экспрессирующих родопсин

*А.Д. Власова¹, С.М. Бухалович¹, Е.И. Шестопёрова¹, В.С. Щукина¹, А.Э. Михайлов¹,
Н.С. Ильинский¹, А.И. Куклин^{1,2}, В.И. Горделий^{1,2,3}*

¹Московский физико-технический институт

²Объединенный институт ядерных исследований

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

Основной задачей оптогенетики является управление мембранным потенциалом нервных клеток с помощью света. Для этого в мембране нейронов экспрессируют белки семейства родопсинов. Среди семейства родопсинов присутствует большое разнообразие активируемых светом ионных каналов и помп, имеющих различную ионную селективность и отличающиеся характеристики фотоцикла [1].

Митохондрии представляют собой органеллы эндосимбиотического происхождения, имеющие собственный геном и аппарат трансляции. Однако, большинство митохондриальных генов в

процессе эволюции мигрировали в ядро клетки, а митохондрии выработали механизмы импорта белков, синтезирующихся на свободных рибосомах в цитозоле. Импортируемые в митохондрии белки имеют сигнальные последовательности (СМЛ), обеспечивающие их импорт [2]. Слияние одного или нескольких повторов СМЛ с N-концом белка позволяет обеспечить его экспрессию в митохондриях клеток.

В данной работе родопсины были экспрессированы в митохондриях клеток НЕК293Т с использованием двух различных сигнальных последовательностей: четыре повтора классического сигнала митохондриальной локализации (4xMTS) а также сигнальная последовательность из ABCB10, мембранного белка семейства ABC-транспортёров. Были Получены соответствующие генетические конструкции вида СМЛ-родопсин-флуоресцентный белок на основе вектора pcDNA3.1 (Рис.1а). Проведена оптимизация условий трансфекции клеток. Трансфекция проводилась с использованием реактива Effectene Transfection Reagent (Qiagen, Германия). В оптимальных условиях наблюдалась локализация канального родопсина 2 (ChR2) в митохондриях. Солокализация YFP и митохондриального красителя MitoTracker Deep Red показана на Рис.1б. Проведены эксперименты по оптогенетическому контролю мембранного потенциала митохондрий (МПМ) клеток НЕК293Т. Детекция МПМ проводилась с помощью потенциал-чувствительного зонда TMRM. Был показан сброс потенциала при активации ChR2, представляющего собой катионный канал.

Полученные результаты согласуются с литературными данными [3],[4]. Экспрессия в митохондриях ранее не исследованных родопсинов открывает новые возможности по оптогенетическому контролю МПМ. Это, в свою очередь, позволит разработать новые подходы к исследованию старения и заболеваний, связанных с нарушением работы митохондрий.

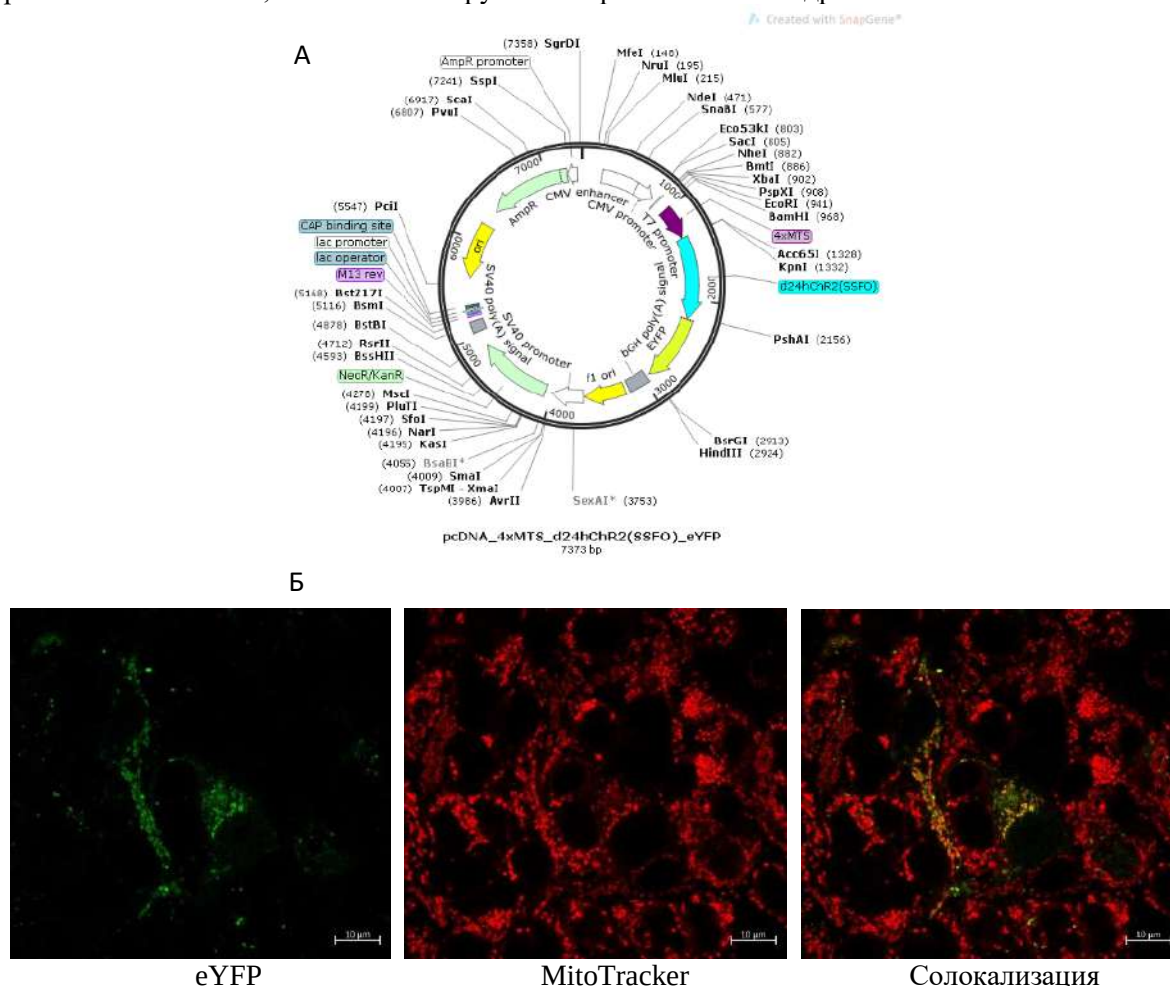


Рис. 1 Конфокальное изображение клеток НЕК293Т, экспрессирующих канальный родопсин 2 (ChR2(SSFO(C128S/D156A))) в митохондриях

А – Карта плазмиды pcDNA3.1_4xMTS_d24hChR2(SSFO(C128S/D156A))_eYFP

Б – Результаты трансфекции клеток НЕК293Т плазмидой

pcDNA3.1_4xMTS_d24hChR2(SSFO(C128S/D156A))_eYFP. Зелёным показано фото флуоресценции eYFP, красным – флуоресценции красителя MitoTracker Deep Red.
Размер масштабной линейки 10 мкм.

Литература

1. *Gushchin I and Gordeliy V.* Microbial rhodopsins // *Subcellular Biochemistry* 2018, 87, P.19-56.
2. *Harbauer A.B. et al.* The protein import machinery of mitochondria - A regulatory hub in metabolism, stress, and disease // *Cell Metab.* 2014, 19 №3, P. 357–72.
3. *Tkatch T. et al.* Optogenetic control of mitochondrial metabolism and Ca^{2+} signaling by mitochondria-targeted opsins // *PNAS* 2017, V. 114, № 26, P. E5167-E5176.
4. *Ernst P. et al.* Precisely Control Mitochondria with Light to Manipulate Cell Fate Decision. // *Biophys. J.* 2019, V. 117, № 4, P. 631–45.

УДК 577.322

Подбор красителей для одномолекулярной спектроскопии рековерина

А. Белоусов, И. Маслов, А. Богородский, В. Борщевский

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рековерин — белок, принадлежащий к суперсемейству EF-hand Ca^{2+} -связывающих белков. Рековерин Ca^{2+} -зависимым образом регулирует активность родопсин-киназы GRK1 в фоторецепторных клетках позвоночных. Известно, что уникальный цистеин рековерина (С39) можно модифицировать флуоресцентным красителем Alexa647, изменения фотофизических свойств которого позволяет следить за конформационными изменениями в белке.[1]

Для изучения конформационной динамики рековерина ранее применялось множество биофизических методов, в том числе методы ЯМР, поверхностного плазмонного резонанса и флуоресцентной микроскопии. Было показано, что рековерин взаимодействует с кальцием с помощью EF-hand 2 и 3, однако при мутации в EF-hand 3 оба домена теряют способность связывать ионы кальция. При связывании Ca^{2+} , белок высвобождает миристоильную группу, с помощью которой связывается с липидным бислоем.

Целью данной работы является поиск флуоресцентных красителей, которые были бы пригодны для наблюдения конформационной динамики рековерина на уровне одиночных молекул. Мы исследовали 4 красителя, основанные на хромофорном ядре GFP, которые так же как и Alexa647 присоединяются к цистеину в 39-ой позиции с помощью малеимид-тиолового взаимодействия.[2] Нами было подтверждено связывание рековерина с красителем, а затем у двух образцов из четырех были зафиксированы изменения фото-физических свойств (спектра, интенсивности и времени жизни) при добавлении к белку CaCl_2 и EGTA.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (№20-34-70034).

Литература

1. T. Gensch, K. E. Komolov, I. I. Benin, P. P. Philippov, and K. W. Koch, “ Ca^{2+} -dependent conformational changes in the neuronal Ca^{2+} -sensor recoverin probed by the fluorescent dye alexa647,” *Proteins Struct. Funct. Genet.*, vol. 66, no. 2, pp. 492–499, Feb. 2007, doi: 10.1002/prot.21231.
2. A. Y. Smirnov *et al.*, “Design of red-shifted and environment-sensitive fluorogens based on GFP chromophore core,” *Dye. Pigment.*, vol. 177, no. October 2019, p. 108258, 2020, doi: 10.1016/j.dyepig.2020.108258.

УДК 577.352.27

Получение и характеристика цистеин-содержащих нанодисков

С.М. Бухалович, А.Э. Михайлов, Ю.Л. Рижиков, А.В. Мишин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

При изучении лиганд-белковых или белок-белковых взаимодействий мембранных белков (МБ) удобно использовать липидные нанодиски (НД) [1]. Эти структуры представляют собой ограниченный белком MSP (Membrane Scaffold Protein) липидный бислой. В процессе получения НД

можно добиться встраивания изучаемого МБ в бислой НД. Таким образом, МБ будет доступен для изучения с обеих сторон поверхности мембраны. Так же белок MSP можно изменять и модифицировать, для более удобного и информативного использования в различных методах в зависимости от его конфигурации.

В данной работе в качестве каркасного белка была выбрана изменённая конфигурация MSP1D1[3], имеющая в своём составе цистеин. Данное изменение позволяет модифицировать MSP с помощью соединений, в состав которых входит малеимид. Так же, на N-конце данного белка имеется полигистидиновый участок (His-tag) для очистки с помощью металл-хелатных смол, и после него сайт TEV-протеазы [5], соединённый через линкер, для удаления His-tag. В качестве встраиваемого в мембрану НД белка была выбрана хорошо изученная светочувствительная протонная помпа[2]. Наличие данного белка, встроенного в НД, а также его нативную конформацию просто определить по характерному поглощению в видимом диапазоне. Соответствующий спектр поглощения представлен на рисунке №1. Этот белок так же имеет на N-конце His-tag. Наличие His-tag позволяет не только очищать белок при выделении, но и использовать широкодоступные антитела на His-tag.

Данная работа ориентирована на исследования методами микромасштабного термофореза (МСТ) и поверхностного плазмонного резонанса (ППР). В рамках исследования методом МСТ были наработаны, выделены и отчищены MSP[3] и МБ[2]. MSP был последовательно обработан Sulfo-Cyanine5 малеимидом / Sulfo-Cyanine3 малеимидом и TEV-протеазой. Изображение молекулы Sulfo-Cyanine5 малеимид представлены на рисунке №2. Максимум поглощения этой молекулы – 646 нм, флуоресценции – 662 нм. После каждой реакции составляющие образцов разделялись с помощью гель-фильтрации с использованием Sephadex G-25, и отбиралась целевая фракция. Перед реакцией модифицирования цистеинов, образец инкубировался с 1мМ дитиотреитола (ДТТ).

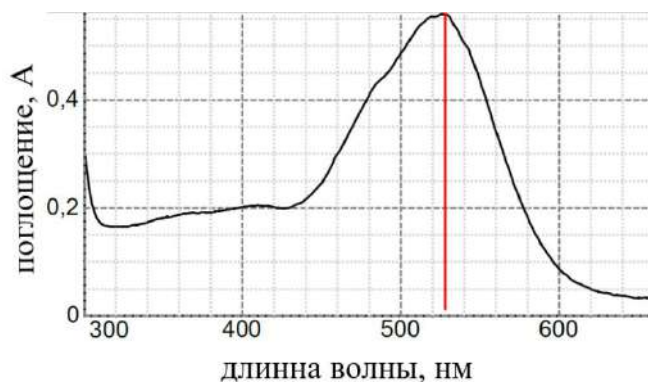


Рис.1. Характерный спектр поглощения MacR

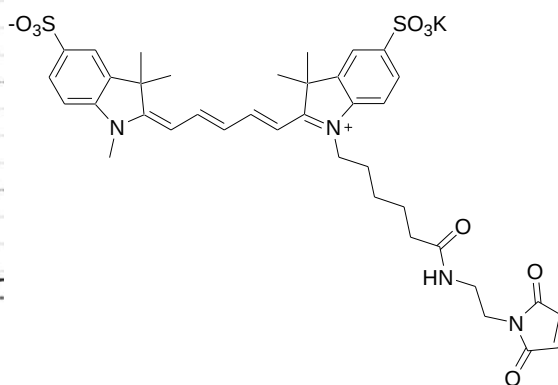


Рис.2. Молекула Sulfo-Cyanine5 малеимида

Отдельно был оптимизирован протокол удаления His-tag. Результаты оптимизации представлены на рисунке №3.

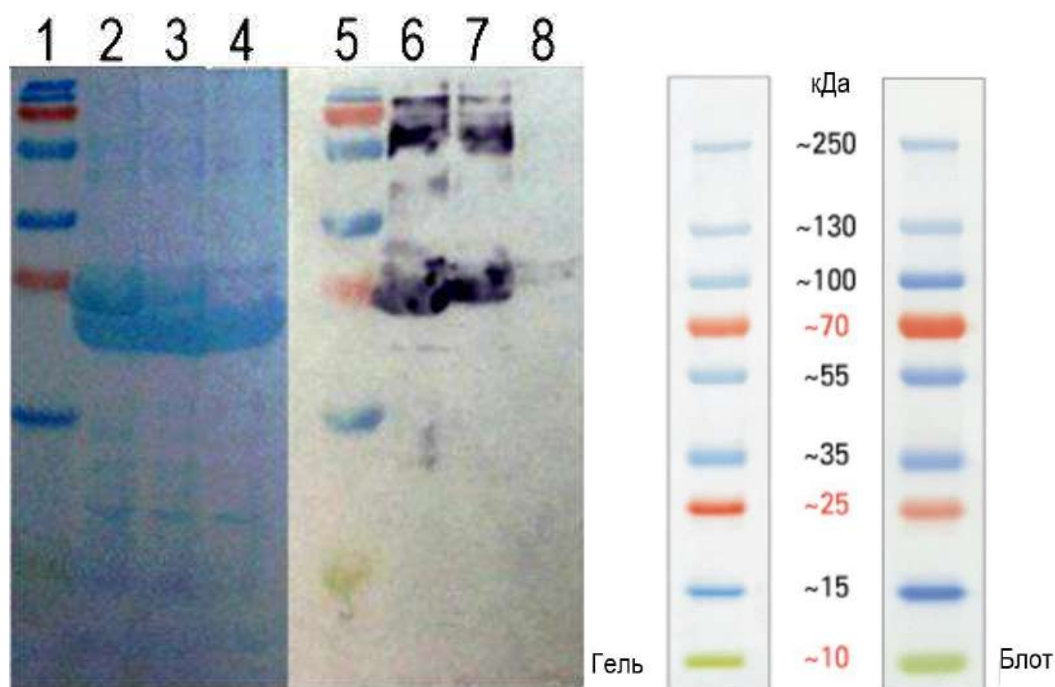


Рис.3. Результаты белкового гель-электрофореза(слева), вестерн-блот гибридизации (справа) образцов с белком MSP, имеющим дополнительно His-tag и TEV-сайт и обработанным TEV-протеазой в течении 3, 5 и 20 часов, соответственно дорожки 2,3,4 и 6,7,8. Также представлен белковый маркер (справа).

Ранее было показано успешное получение аналогичных НД со встроенным в мембрану НД белком BR[4]. Таким образом, продемонстрирован удобный способ характеристики МБ.

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

Литература

1. Denisov I.G., Grinkova Y.V., Lazarides A.A. and Sligar S.G., Directed Self-Assembly of Monodisperse Phospholipid Bilayer Nanodiscs with Controlled Size, JACS Articles (2004), pp. 3477-3487
2. Melnikov I, [et al.] Fast iodide-SAD phasing for high-throughput membrane protein structure determination, Science Advances (2017)
3. Ritchie T.K., Grinkova Y.V., Bayburt T.H., Denisov I.G., Zolnerciks J.K., Atkins W.M., Sligar S.G., Reconstitution of membrane proteins in phospholipid bilayer nanodiscs, Methods in Enzymology (2009), pp. 211–231 (Chapter 11)
4. Бухалович С.М., Михайлов А.Э., Шевцов М.В., Рижиков Ю.Л., Чупин В.В., Мишин А.В., Исследование распределения размеров цистеин-содержащих нанодисков с помощью динамического светорассеяния, 62-я Всероссийская научная конференция МФТИ (2019)
5. Kapust R.B., Waugh D.S., Controlled intracellular processing of fusion proteins by TEV protease, Protein Expression and Purification (2000)

УДК 57.033

Почему ДНК конденсируется в присутствии ионов натрия легче, чем в присутствии ионов калия

Е.С. Колесников¹, И.Ю. Гуцин¹, П.А. Жилев², А.В. Онуфриев³

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Center for Design, Manufacturing and Materials, Skolkovo Institute of Science and Technology

³Политехнический университет Виргинии

Внутри ядра клетки, содержание ионов калия сильно превышает количество натрия, в то время как в межклеточном пространстве натрия наоборот преобладает. ДНК хранит генетическую информацию и позволяет клеткам размножаться и синтезировать необходимые полимеры. Сама

молекула ДНК хранится внутри ядра клеток в компактном виде, а значит взаимодействует в основном с ионами калия, а не натрия. В то же время экспериментальные буферы обычно содержат соли натрия, что не отражает нативных внутриклеточных условий. Возникает вопрос: насколько корректно использование хлорида натрия вместо хлорида калия для имитации внутриклеточной среды? Ранее были опубликованы результаты экспериментального исследования конденсации ДНК в растворах солей различных одновалентных ионов с добавлением полиэтиленгликоля [1], который моделирует содержащиеся в ядре биополимеры. Было показано, что в растворе хлорида натрия ДНК конденсируется при меньшей концентрации соли, чем в растворе хлорида калия. Это говорит о зависимости некоторых процессов от типа иона, взаимодействующего с ДНК.

В данной работе проведены исследования зависимости конденсации ДНК от типа одновалентного иона в условиях, имитирующих внутриклеточные. Сравнения проведены между натрием и калием. При помощи метода молекулярной динамики получены распределения ионов вокруг двух нитей ДНК. Чтобы установить связь между распределением ионов и склонностью иона конденсировать ДНК, мы используем модель оболочек. В рамках этой теории пространство вокруг оси спиральной молекулы делится на несколько областей. Слой внутреннего радиуса $7\text{\AA}$, и внешнего $12\text{\AA}$, ось которого совпадает с осью полимера, называется внутренней оболочкой, слой от 12 до $16\text{\AA}$ – внешней. Теория утверждает, что чем больше ионов находится во внешней оболочке ДНК, тем легче она конденсируется. Пример системы показан на рис. 1.

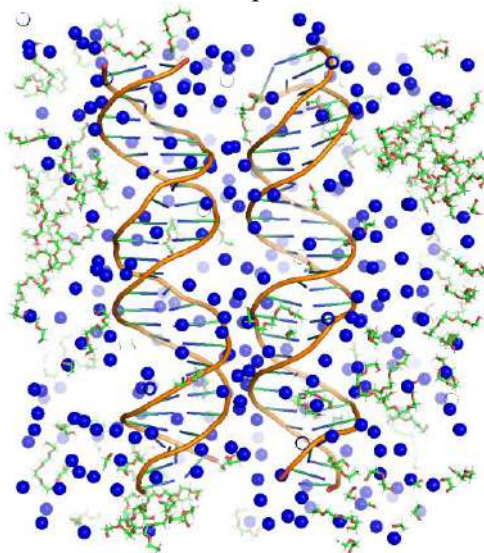


Рис. 1. Исследуемая система. Изображены 2 участка ДНК, ионы натрия (синие сферы) и полиэтиленгликоль (красные участки – кислород, зеленые – углерод).

Проведенные исследования показали, что во внешних оболочках нитей ДНК в системах с натриевой солью скапливается больше ионов, чем с калиевой в большом диапазоне концентраций солей. Конечная разница энергий между двумя системами составила около 1 кТ вне зависимости от концентрации соли. Это значит, что вероятность конденсации в натриевом растворе выше в 2,5-3 раза. Также среднее по времени расстояние между нитями ДНК в растворах с ионами натрия было меньше, чем с ионами калия при одинаковой концентрации. Это позволяет объяснить результаты эксперимента с позиций теории ионных оболочек – увеличение количества ионов в пересечении внешних оболочек двух участков ДНК сопровождалось снижением энергии системы и сближением дуплексов.

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

Литература

1. Zinchenko A., Yoshikawa K. (2005). Na^+ Shows a Markedly Higher Potential than K^+ in DNA Compaction in a Crowded Environment. *Biophysical Journal*, 88, 4118–4123. <https://doi.org/10.1529/biophysj.104.057323>
2. Tolokh I.S., Drozdetski A.V., Pollack L., Baker N.A., Onufriev A.V. (2016). Multi-shell model of ion-induced nucleic acid condensation. *The Journal of Chemical Physics*, 144(15), 155101. <https://doi.org/10.1063/1.4945382>

Измерение константы связывания мембранных белков с лигандами при помощи MST

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

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Мембранные белки (МР) играют важнейшую роль в метаболизме, передаче сигналов, подвижности клеток, транспорте, развитии и во многих других биохимических и биофизических процессах. Детальное понимание этих процессов необходимо для прогресса наук о жизни и биомедицинских приложений. При изучении мембранных белков возникают проблемы связанные с изменением или потерей активности и функции белка вне фосфолипидной среды. Для стабилизации мембранных белков разработаны фосфолипидные бислои, называемые нанодисками. Нанодиски состоят из фосфолипидов, которые окружены двумя амфипатическими спиральными белковыми поясами, которые называются белками мембранного каркаса «Membrane Scaffold Protein» (MSP). Нанодиски все чаще используются в качестве «кассет», которые позволяют анализировать МР без денатурации с помощью различных аналитических методов, включая поверхностный плазмонный резонанс, электрохимию и оптические волноводы. [1]

Для изучения белковых взаимодействий широко применяется метод микромасштабного термфореза (MST). MST основывается на измерении вызванных связыванием изменениях термфоретической подвижности, которая обнаруживается по флуоресценции одного из партнеров по связыванию. Было показано, что малеимидные красители могут быть использованы для мечения сульфгидрильных групп, присутствующих в восстановленных остатках цистеина. [2]

Целью данной работы является создание мутантных MSP, которые позволили бы провести исследования мембранных белков с помощью метода MST, а также измерение констант связывания мембранного белка с его лигандами.

Для проведения экспериментов использовался метод одношаговой ПЦР для получения мутаций G11C, G132C в конструкции MSP1D1 и G11C, G196C в конструкции MSP1E3D1. Данные мутации необходимы для внедрения в состав белка остатков цистеина, к которому возможно присоединение флуоресцентного красителя.

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

Литература

1. I. G. Denisov and S. G. Sligar, "Nanodiscs for structural and functional studies of membrane proteins," Nat. Struct. Mol. Biol., vol. 23, no. 6, pp. 481–486, 2016, doi: 10.1038/nsmb.3195.
2. S. A. I. Seidel et al., "Microscale thermophoresis quantifies biomolecular interactions under previously challenging conditions," Methods, vol. 59, no. 3. Academic Press Inc., pp. 301–315, Mar. 01, 2013, doi: 10.1016/j.ymeth.2012.12.005.

Различия в физико-химических свойствах LOV-домена, связанного с рибофлавином и флавиномононуклеотидом (FMN)

А.А. Смоленцева, А.Н. Юденко, И.М. Гончаров, В.В. Назаренко, А.А. Ремеева, И.Ю. Гуцин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

LOV-домены (light-oxygen-voltage) - высококонсервативное семейство фоторецепторов, чувствительных к синему свету. Как правило, белки семейства LOV в клетке связывают флавины, такие как флавиномононуклеотид (FMN), флавинадениндинуклеотид (FAD) или рибофлавин (RF). Для некоторых LOV-доменов было также показано связывание структурно модифицированных хромофоров *in vitro* (LC, 7-Br-RF, 8-Cl-RF [1], DMFMN, iprFMN [2]) и *in vivo* (розеофлавин [3]). Вид хромофора может значительно изменять свойства белка (например, спектр поглощения и эмиссии, квантовый выход флуоресценции [1] или кинетику фотоцикла [2]).

Недавно в нашей лаборатории был охарактеризован новый термостабильный белок CagFbFP, полученный из LOV-домена растворимой гистидин киназы термофильной бактерии

Chloroflexus aggregans [4]. Изучая его термостабильность, мы обнаружили два пика на кривой плавления ($T = 67\text{ }^{\circ}\text{C}$ и $T = 81\text{ }^{\circ}\text{C}$). Было сделано предположение, что эти пики соответствуют нескольким популяциям белка, связавшим при экспрессии в клетке разные флавины. Целью данной работы было определение зависимости температуры плавления и других характеристик белка CagFbFP от вида хромофора.

Были подготовлены образцы, каждый из которых содержал только один вид хромофора – рибофлавин, FMN, FAD или LC. Для этого был произведён рефолдинг CagFbFP на металл-аффинном сорбенте с использованием GuHCl , в результате которого мы получили CagFbFP в апо-форме. Далее апо-CagFbFP инкубировался с одним из хромофоров. Несвязавшийся лиганд был удалён при смене буфера.

У всех образцов CagFbFP, реконституированного с разными хромофорами, была измерена температура плавления. Кривые плавления всех образцов имели по одному пику. Белок, связавший FMN, продемонстрировал самую высокую термостабильность: $T = 81\text{ }^{\circ}\text{C}$. Температура плавления белков, кофакторами которых были RF и FAD, равнялась $67\text{ }^{\circ}\text{C}$. Образец с LC оказался наименее термостабильным: $T = 60\text{ }^{\circ}\text{C}$. Также были измерены спектры поглощения и эмиссии, скорость выгорания белка при продолжительном облучении, яркость и квантовый выход всех белков.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-34-70109.

Литература

1. V. Arinkin et al. Structure of a LOV protein in apo-state and implications for construction of LOV-based optical tools // Scientific Reports. 2017. V. 7
2. M. Mansurova et al. Chromophore Exchange in the Blue Light-Sensitive Photoreceptor YtvA from *Bacillus subtilis* // ChemBioChem. 2011. V. 12. P. 641-646
3. T. Mathes et al. In Vivo Generation of Flavoproteins with Modified Cofactors // Journal of Molecular Biology. 2009. V. 385. P. 1511-1518
4. V. V. Nazarenko et al. A thermostable flavin-based fluorescent protein from *Chloroflexus aggregans*: a framework for ultra-high resolution structural studies // Photochem. and Photobiol. Sci. 2019. P. 1793-1805.

УДК 577.322.9

Разработка протоколов и структурные исследования рекомбинантных апоферритинов из различных организмов

**В.В. Сударев¹, А.В. Власов^{1,2,3}, С.В. Баженов¹, Н.А. Бондарев¹, Ю.Л. Рижиков^{1,2}, С.Д. Осипов¹,
В.И. Горделий^{1,4,5}, И.В. Манухов¹, А.И. Куклин^{1,2}**

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Объединенный институт ядерных исследований

³ Institute of Crystallography, RWTH Aachen University

⁴ Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes—Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives—CNRS

⁵ JuStruct: Jülich Center for Structural Biology, Forschungszentrum Jülich

Ферритин является одним из основных железосодержащих белков в организме, главной функцией которого считается хранение и транспорт железа. Одна молекула белка может содержать до 4500 ионов этого микроэлемента в форме ферригидрита [1]. Белок, лишенный железа, называется апоферритин. С возрастом концентрация ферритина в крови человека растёт, что свидетельствует об участии этого белка в процессах старения организма.

В работе были получены рекомбинантные белки апоферритины из организмов *Helicobacter pylori* и *Escherichia coli*. Экспрессионные конструкции были получены на основе вектора pSol SUMO [2], в котором целевые гены были поставлены под контроль рамнозного промотора [3]. Белок включает в себя His-Tag для очистки методом никелевой аффинной хроматографии с последующей доочисткой гель-фильтрацией. Экспрессия проводилась в штамме *E. coli* BL21 в безнатриевой и безмагниевой культуральной среде (CM). Удельный выход белка составил порядка ~40% от тотального белка клетки.

Проведена отработка условий экспрессии целевых белков. Сравнение сред CM и Rich Medium (RM, ZYP-5052 [4] с модификацией в виде замены лактозы на рамнозу) показало, что при

одинаковом удельном уровне биосинтеза целевого белка (апоферритин *H. pylori*) биомасса достигает большей плотности на RM (19 OD для RM против 13-14 OD для CM). Сравнение прототрофного штамма *E. coli* MG1655 с *E. coli* BL21 показало, что при примерно одинаковом удельном уровне биосинтеза целевого белка биомасса MG1655 достигает 26 OD против 19 OD для BL21.

Рекомбинантный апоферритин был выделен и очищен в количестве 20 мг и исследован методами малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) и динамического светорассеяния (ДРС). В качестве контрольного препарата использовался коммерчески-доступный апоферритин из селезенки лошади (MERCK, apoferritin from equine spleen). Получены гидродинамические радиусы апоферритинов разных организмов методом динамического светорассеяния на приборе DynaProNanoStar. Исследование структурных свойств методом МУРР проведено на установке Rigaku [5].

Полученные данные подтверждают структурную близость апоферритинов из различных организмов. Данные, полученные методом ДРС, показывают совпадение гидродинамических радиусов белков. Форм-фактор апоферритинов, полученный с помощью метода МУРР, хорошо согласуется с данными структур высокого разрешения из библиотеки Protein Data Bank (PDB) и литературными данными [6,7].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение # 075-00337-20-03, проект FSMG-2020-0003).

Литература

1. Ford G.C. et al. Ferritin: design and formation of an iron-storage molecule //Philosophical Transactions of the Royal Society of London. B, Biological Sciences. 1984. V. 304. №. 1121. P. 551-565.
2. Steinmetz E. Espresso® cloning and expression systems: Expressioneering™ Technology streamlines recombinant protein expression //Nature Methods. – 2011. – Т. 8. – №. 6. – С. iii-iv.
3. Gibson D.G. et al. Enzymatic assembly of DNA molecules up to several hundred kilobases //Nature methods. 2009. V. 6. №. 5. P. 343-345.
4. Studier F.W. Protein production by auto-induction in high-density shaking cultures //Protein expression and purification. 2005. V. 41. №. 1. P. 207-234.
5. 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.
6. Kuklin A.I. et al. Comparative study on low resolution structures of apoferritin via SANS and SAXS //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2012. V. 351. №. 1. P. 012009.
7. Zabelskii D.V. et al. Ambiguities and completeness of SAS data analysis: investigations of apoferritin by SAXS/SANS EID and SEC-SAXS methods //Journal of Physics: Conf. Series. 2018. V. 994. P. 012017-1.

УДК 577.29

Создание штамма-продуцента белков семейства глутаматных транспортеров SLC1A в экспрессионной системе LEXSY

М.Б. Волкова¹, Д. А. Корнилов¹, А. В. Розачев^{1,2}, А. И. Гуськов^{1,3}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Объединенный институт ядерных исследований

³ Университет Гронингена

SLC1A - семейство мембранных белков, куда входят глутаматные транспортеры, одной из основных функций которых является транспорт важного нейромедиатора - глутаминовой кислоты. Известно, что дисфункция в работе этих белков может приводить к тяжелым заболеваниям ЦНС, таким, как амиотрофический склероз и шизофрения. Одной из возможных причин этого является избыток глутаминовой кислоты в синаптической щели, который не может быть вовремя откачан, что приводит к перевозбуждению нейронов [1]. Получение детальной информации о структуре и биофизических свойствах белков семейства SLC1A позволит понять на молекулярном уровне фундаментальные механизмы работы этих белков и их функции. На данный момент решена пространственная структура только двух представителей семейства SLC1A, а также архейных гомологов [2].

В работе исследуются два представителя белков EAAT4 и EAAT5 семейства глутаматных транспортеров SLC1A. Для выполнения структурно-функциональных исследований, включая рентгеновскую кристаллографию и крио-электронную микроскопию, требуется получение препаратов

очищенного белка в достаточных количествах. Для этого необходимо выполнить подбор подходящей системы и условий их экспрессии.

Для получения белков EAAT4 и EAAT5, кодируемых генами SLC1A6 и SLC1A7 соответственно, была выбрана эукариотическая индуцируемая система экспрессии LEXSY на основе одно-клеточного простейшего *Leishmania tarentolae*. Данная система осуществляет полный набор пост-трансляционных модификаций с практически идентичным человеческому профилю N-гликозилирования. С помощью электропорации произведена трансфекция клеток *L. tarentolae* (штамм LEXSY host T7-TR) экспрессионной кассетой, в составе нуклеотидной последовательности которой содержались гены целевых белков, а также T7 промотор и ТЕТ-оператор. Для отбора клонов с высоким уровнем экспрессии целевых генов произведена оценка флуоресценции коэкспрессируемого белка BleCherry в каждой из проб с использованием фотометра Synergy HTX Multi-Mode (BioTek, США). Белки EAAT4 и EAAT5 были выделены с помощью афинной хроматографии на сорбенте Ni-NTA (Qiagen, США). Наличие целевого белка было подтверждено методом вестерн-блоттинга.

В результате работы разработаны протоколы получения целевых белков EAAT4 и EAAT5 в экспрессионной системе LEXSY. Дальнейшие исследования включают в себя подбор условий для очистки полученного белка, а также подбор параметров кристаллизации и витрификации проб для их дальнейшего изучения методами рентгеновской кристаллографии и крио-электронной микроскопии.

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

Литература:

1. Nicole Schneider, Sonke Cordeiro Jan-Philipp Machtens, Simona Braams, Thomas Rauen, Christoph Fahlke, Functional Properties of the Retinal Glutamate Transporters GLT-1c and EAAT5 // THE JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY VOL. 289, NO. 3, January 17, 2014, pp. 1815–1824.
2. Guskov A, Jensen S, Faustino I, Marrink SJ, Slotboom DJ. Coupled binding mechanism of three sodium ions and aspartate in the glutamate transporter homologue GltTk. Nat Commun. 2016, Nov. (doi: 10.1038/ncomms1342).

УДК 576.6

Способность поездов системы интрафлагеллярного транспорта конвертироваться из антероградной формы в ретроградную вне цилиарного кончика

И.О. Зыков^{1,2}, Г. Пигино¹

¹Институт Макса Планка молекулярной клеточной биологии и генетики

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Эукариотическая цилия — это органелла состоящая из девяти дублетов микротрубочек. Имея вытянутую форму и плотное внутреннее расположение органелл, цилии для обеспечения собственной сборки и обслуживания не могут иметь диффузионный транспорт. Вместо этого высокодинамичная система интрафлагеллярных транспортных поездов (ИТП) осуществляет движение вверх и вниз по цилии с высокой скоростью. Однако механизм того, как эти поезда преобразуются и разворачиваются по достижении цилиарного наконечника, остается неясным. Было выдвинуто предположение, что существует специальный белковый механизм на цилиарном кончике, чтобы осуществлять это преобразование. В данной работе были использованы физические и химические методы, чтобы посредством вмешательства в ИТП в жгутиках одноклеточной зеленой водоросли *Chlamydomonas Reinhardtii* показать, что такого стационарного механизма не существует и что преобразование поездов ИТП является неотъемлемой способностью самой транспортной системы.

Сначала ИТП был физически блокирован в клетках *C. Reinhardtii*. Чтобы приложить мягкое, но постоянное усилие к определенному месту на жгутике подвижной клетки, были сделаны острые силиконовые клинья путем капельного литья силиконовой смолы на конец стеклянного капилляра, лежащего на предметном стекле. Затем капля отвердевалась на нагревательной плите, и излишки отсекались по бокам скальпелем. Наконец, этот клин был установлен на гидравлическом микроманипуляторе, смонтированном на флуоресцентном микроскопе полного внутреннего отражения (TIRF), где он был осторожно опущен на жгутики клеток, скользящих по поверхности стекла. Недостаточное давление приведет к тому, что ИТП пройдут через барьер, в то время как чрезмерное давление

повредит или даже разорвет жгут, что приведет к немедленной остановке всех видимых ИТП из-за утечки АТФ из места разреза. Использование правильного количества давления привело к локальной блокировке. После ослабления давления путем втягивания клина интрафлагеллярный транспорт возобновится без каких-либо заметных остаточных эффектов. Этот эффект удалось воспроизвести несколько раз на одном и том же месте с почти одинаковыми результатами.

Вскоре после опускания клина на жгут, поезда с обеих сторон начинают накапливаться по обе стороны от Клина, а кончик жгута быстро истощается. Примечательно, что на стороне клеточного тела блока примерно через 23 секунды после блокировки появляются ретроградные поезда. Когда клин втягивается, движение искусственно остановленных поездов по обе стороны клина возобновляется.

Затем было определено, что наблюдаемое преобразование не является результатом механического вмешательства или невидимого повреждения аксоны, вызванного применением клина [1]. Поэтому, чтобы дополнить результаты механической блокировки поездов, клетки были обработаны 13 мМ LiCl, который ингибирует двигатели ИТП [2], вызывая частые паузы в движении поездов. Это торможение локомоции приводит к накоплению антероградных ИТП-поездов вдоль цилии, которые часто не смещаются сами по себе. Однако было замечено, что движение клетки, скользящей по стеклу, часто достаточно, чтобы восстановить локомоцию большинства застрявших поездов. Накопленные поезда при этом демонстрируют лавинообразное ретроградное движение, как только клетка начинает скользить. В таких случаях антероградного переноса не наблюдалось.

Литература

1. Bliss T.V., Collingridge G.L. Expression of NMDA receptor-dependent LTP in the hippocampus: bridging the divide // *Mol Brain*. 2013. 6, 5.
2. Nedra F.W., Paul A.L. Regulation of Flagellar Assembly by Glycogen Synthase Kinase 3 in *Chlamydomonas reinhardtii* // *Eukaryotic Cell*. Oct 2004, 3 (5) 1307-1319.

УДК 577.322.9

Сравнение эффективности родопсинов-протонных помп для оптогенетического контроля мембранного потенциала клетки

С.М. Долотова¹, С.М. Бухалович¹, А.Э. Михайлов¹, А.Д. Власова¹, А.И. Ку克林^{1,2},
В.И. Горделий^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт ядерных исследований

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

Родопсины – семиспиральные мембранные белки, способные под действием света переносить ионы через клеточную мембрану. Среди представителей этого семейства встречаются ионные каналы и насосы, а переносимыми ионами могут быть ионы водорода, натрия, калия, кальция и хлора. Подобные белки широко распространены среди прокариот и одноклеточных эукариот [1]. Особый интерес представляют родопсины-протонные помпы, экспрессируемые морскими бактериями и археями, которым необходим альтернативный стандартному развитый родопсиновый фотосинтез. Он интересен с прикладной точки зрения, потому что он является альтернативой электрон-транспортной цепи, которая не производит активных форм кислорода.

Протонный мембранный потенциал на поверхности клеток бактерий или архей обеспечивает работу жгутиков и АТФ-синтазы, и родопсиновые протонные помпы (РПП) являются важным инструментом для его создания и поддержания [2]. Из всех известных РПП наиболее хорошо изучен бактериородопсин. Целью исследования является сравнение эффективности работы следующих белков из группы РПП: MacR (Marine Actinobacterial Clade Rhodopsin), XeR (ксенородопсин), BR (бактериородопсин), PR (протеородопсин) и AR (археородопсин). MacR, PR, BR и AR выделены из разных организмов, однако имеют сходное строение и выполняют одинаковую функцию. XeR в свою очередь является инвертированной протонной помпой, поэтому он интересен для выполнения обратных задач.

В настоящей работе были проведены эксперименты по контролю протонного мембранного потенциала в бактериях *E.coli* (штамм C41) с помощью света. Для этого в выбранном штамме *E.coli*

были экспрессированы выбранные родопсины. Для оценки эффективности родопсинов были проведены pH-тесты. Клетки промывали ледяным 100 мМ раствором NaCl. Изменение pH суспензии клеток при освещении белым светом регистрировали при помощи pH-метра SevenEasy METTLER TOLEDO. После включения освещения (лампа Olympus, 3000K) наблюдалось повышение pH суспензии клеток с XeR (рис. 1А) и снижение pH – с остальными белками (рис. 1Б). Наибольший ответ наблюдался у AR, изменение pH при освещении светом в течение 5 минут составило -0,2 pH, для PR, MacR, BR и XeR оно составило -0,18, -0,14, -0,11 и 0,11 соответственно. При добавлении к суспензии разбавителя СССР (карбонил-цианид-*m*-хлорофенилгидразон) эффект сводился практически к нулю у всех белков.

Таким образом, наиболее перспективным для дальнейших исследований является AR, так как при одинаковых условиях экспрессии его эффект оказался наибольшим по сравнению с остальными РПП. Данный белок можно использовать в оптогенетических экспериментах по контролю протонного мембранного потенциала не только бактериальных клеток, но и различных органелл эукариотических клеток, в том числе митохондрий. Подобные исследования дают возможность более подробно изучить процессы на внутренней мембране митохондрии без влияния дыхания на общее состояние клетки.

Литература

1. Govorunova E.G., Sineshchekov O.A., Li H., Spudich J.L. Microbial rhodopsins: diversity, mechanisms, and optogenetic applications // Annual Review of Biochemistry. 2017. V. 86. P. 845.
2. Walter J.M., Greenfield D., Bustamante C., Liphardt J. Light-powering *Escherichia coli* with proteorhodopsin // PNAS. 2007. V. 104. P. 2408.

УДК 577.29

Структурно-функциональные исследования мутантных форм фотореакционного центра *Rhodobacter sphaeroides*

А.А. Атамас¹, Г.К. Селиханов², Л.Г. Васильева³, Т.Ю. Фуфина³, А.Г. Габдулхаков²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт белка РАН

³Институт фундаментальных проблем биологии РАН

Фотосинтетический реакционный центр *Rhodobacter sphaeroides* (РЦ) является трансмембранным пигментно-белковым комплексом и состоит из трех полипептидных цепей: L, M и H. Внутри комплекса располагаются кофакторы, участвующие в формировании электрон-транспортной цепи. Кофакторы представлены димером бактериохлорофиллов, двумя мономерами бактериохлорофиллов, двумя молекулами бактериофеофитинов, двумя молекулами убихинонов, ионом негемового железа Fe²⁺ и молекулой каротиноида [1].

На данный момент многие исследования направлены на изучение белкового окружения кофакторов, которое влияет на фотохимическое разделение зарядов. Большинство таких исследований основывается на замене определенных аминокислотных остатков в субъединицах реакционного центра. Иногда такие мутации приводят к существенному ухудшению стабильности РЦ. Такие реакционные центры становятся неустойчивы к замораживанию/оттаиванию и повышению температуры, что приводит к проблемам хранения и кристаллизации. [2]. Наша задача повысить устойчивость фотосинтетического центра таким образом, чтобы, при внесении различных мутаций, РЦ оставался достаточно стабильным для проведения исследований.

В ходе работы были получены три мутантные формы реакционного центра, в которых в L-субъединице аминокислоты Ala37 и Ser99, Ala53 и Ile64, Ala172 и Leu246 заменялись на цистеин. Мы предполагаем образование дисульфидных связей, которые могут стабилизировать пигментно-белковый комплекс. Аминокислотные замены находятся в различных областях мембранной части РЦ и расположены на расстоянии от кофакторов и не должны напрямую влиять на транспорт электронов. Полученные мутантные формы A37C/S99C и A172C/L246C имели сниженную фотохимическую активность, но при этом мутации A53C/I64C на фотохимическую активность не повлияли. Так же было показано, что РЦ с полученными мутациями устойчивы к заморозке/оттаиванию.

На данный момент проводится выделение мутантных РЦ *Rhodobacter sphaeroides* для дальнейшего структурно-функционального исследования.

Литература

1. Camara-Artigas A., Brune D., Allen J. P. Interactions between lipids and bacterial reaction centers determined by protein crystallography // PNAS USA 99. 2002. P: 11055–11060.
2. Фуфина, Т. Ю., Васильева, Л. Г., Шувалов, В. А. Исследование стабильности мутантного фотосинтетического реакционного центра *Rhodobacter sphaeroides* I(L177)H и установление местоположения бактериохлорофилла, ковалентно связанного с белком // Биохимия. 2010. (pp. 256 – 263).

УДК 577.29

Структурно-функциональные особенности белка Е оболочки коронавируса SARS-CoV-2

А.С. Кузьмин¹, Ф.С. Орехов^{1,2}, И.Ю. Гуцин¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Вирус SARS-CoV-2 (Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2) является штаммом коронавируса, который стал причиной пандемии инфекционного заболевания COVID-19 (coronavirus disease 2019). Вирусная частица SARS-CoV-2, помимо РНК и липидной оболочки, состоит из четырёх основных структурных белков: S (“Spike”) отвечает за присоединение и слияние с клеткой хозяина; М (“Membrane”) играет основную роль в сборке вирионов; N (“Nucleocapsid”) является упаковкой для РНК; Е (“Envelope”) способствует сборке вирионов, снижению стрессовой реакции клетки-хозяина, эффективному переносу вирионов по секреторному пути и проявляет активность ионного канала.

Белки оболочки (Е) - это небольшие мембранные белки, обычно имеющие одну трансмембранную спираль на своём N-конце и одну-две амфифильных спирали на С-конце. Для белка SARS-CoV-2 Е известна аминокислотная последовательность (75 аминокислот) и накоплено большое количество сведений о близкородственных белках Е вирусов SARS-CoV и MERS, последовательность которых на 95% и 36% идентична. Также известно, что белок Е может подвергаться гликозилированию и пальмитоилированию, однако роль данных посттрансляционных модификаций не ясна. В зараженных клетках белок Е локализуется, в основном, в промежуточном между эндоплазматическим ретикуломом и комплексом Гольджи компартменте ERGIC [1].

В данной работе исследование особенностей SARS-CoV-2 Е проводилось при помощи метода молекулярной динамики с использованием силового поля MARTINI [2] для крупнозернистого моделирования и силового поля CHARMM36m [3] для детального полноатомного моделирования, реализованного в программном пакете GROMACS. Стартовой моделью для изучения стал полноразмерный протомер из пентамерной модели [4], созданной в лаборатории Майкла Фейга из Мичиганского государственного университета (США). Исследование было направлено на выяснение влияния пальмитоилирования [5] трёх цистеиновых остатков амфифильной спирали на структуру и поведение мономера, а также влияния самого мономера на бислойную систему из модельных липидов POPC и близких к нативному составу липидов мембраны ERGIC.

Анализ полученных результатов показал, что пальмитоилирование амфифильной спирали мономера влияет на среднее угловое положение остатков этой спирали относительно плоской поверхности бислоя и, в некоторых случаях, увеличивает угол наклона трансмембранной спирали относительно нормали к бислою. Анализ состояния верхнего и нижнего монослоёв бислоя показал, что присутствие мономера, как в пальмитоилированном так и непальмитоилированном виде, вызывает заметное искривление мембраны возле него (рис. 1), что в заражённой клетке может способствовать отпочковыванию новой вирусной частицы.

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

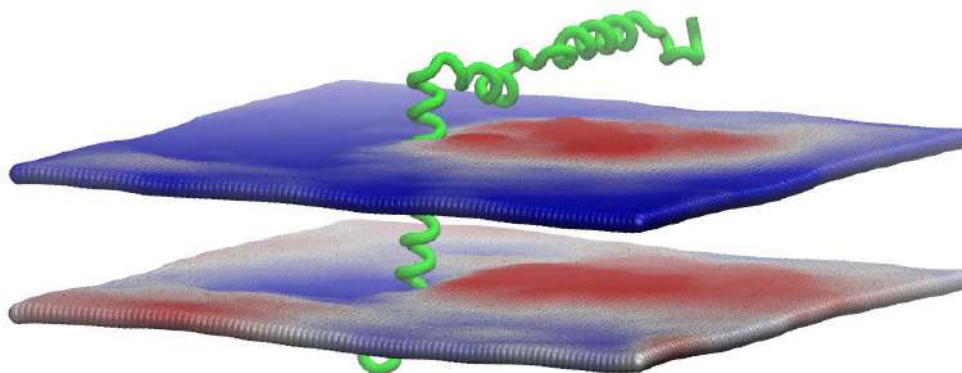


Рис. 1. Усреднённое по времени положение границ бислоя, характеризующее возмущение мембраны вокруг мономера белка Е вируса SARS-CoV-2. Белый цвет бислоя соответствует среднему положению мембраны, синий - пониженному, а красный - повышенному.

Литература

1. Ruch T. R., Machamer C. E. The coronavirus E protein: assembly and beyond //Viruses. 2012. V. 4. №. 3. p. 363-382.
2. Marrink S. J. et al. The MARTINI force field: coarse grained model for biomolecular simulations //The journal of physical chemistry B. 2007. V. 111. №. 27. p. 7812-7824.
3. Huang J. et al. CHARMM36m: an improved force field for folded and intrinsically disordered proteins //Nature methods. 2017. V. 14. №. 1. p. 71-73.
4. Heo L., Feig M. Modeling of Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2 (SARS-CoV-2) Proteins by Machine Learning and Physics-Based Refinement //bioRxiv 2020.03.25.008904; doi: <https://doi.org/10.1101/2020.03.25.008904>
5. Atsmon-Raz Y., Tieleman D. P. Parameterization of palmitoylated cysteine, farnesylated cysteine, geranylgeranylated cysteine, and myristoylated glycine for the Martini force field //The Journal of Physical Chemistry B. 2017. V. 121. №. 49. p. 11132-11143.

УДК 577.322.63

Структурные изменения белков, связанные с радиационным повреждением

В. Вистунов¹, К. Ковалёв^{2,1}, А. Богородский¹, С. Бухдрукер¹, Е. Марьин¹, В. Борщевский¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Institut de Biologie Structurale J.-P. Ebel, Université Grenoble Alpes-CEA-CNRS

Повреждение кристаллов белка, вызванное рентгеновским изучением, до сих пор является лимитирующим фактором для получения структур высокого разрешения в макромолекулярной кристаллографии [1]. На примере бактериородопсина было показано, что даже небольшие дозы, меньше чем 0.06 МГр, могут вызвать структурные модификации в активном центре мембранного белка, связанные с появлением так называемых “оранжевых видов” [2].

В данной работе мы обнаружили структурные изменения при относительно небольшой (менее 1 МГр) поглощённой дозе в активном центре родопсина - светочувствительного мембранного белка, выполняющего функцию протонного насоса. Первым заметным изменением, связанным с радиационным повреждением, стало постепенное исчезновение молекулы воды около шиффового основания ретиналя. Динамика данного процесса была количественно описана такими параметрами как заселённость и В-фактор Вильсона, по изменению которых можно судить о степени радиационного повреждения кристалла. При дальнейшем увеличении дозы (около 5 МГр) было зафиксировано конформационное изменение боковой группы метионина, расположенного около активного центра.

Таким образом, наши результаты свидетельствуют о вероятном появлении у данного вида родопсина “оранжевых видов”, изучение которых будет впоследствии дополнено анализом спектроскопических данных.

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

Литература

1. Garman E.F. and Weik M. "Radiation damage to biological macromolecules: some answers and more questions", J.Synchrotron Rad. (2013)
2. Borshchevskiy V. et al. "Low-dose X-ray radiation induces structural alterations in proteins", Acta Crystallographica Section, D70, 2675-2685 (2014)

УДК 577.322.9

Структурные исследования самособирающихся рекомбинантных химерных белковых комплексов на основе апоферритина

А.В. Власов^{1,2,3}, А.Д. Власова¹, Ю.Л. Рижиков¹, С.В. Баженов¹, Н.А. Бондарев¹, В.В. Сударев¹,
С.Д. Осипов¹, Ю.С. Семёнов¹, В.И. Горделий^{1,4,5}, И.В. Манухов¹, А.И. Куклин^{1,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Institute of Crystallography, RWTH Aachen University

³Объединенный институт ядерных исследований

⁴ Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes—Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives—CNRS

⁵ JuStruct: Jülich Center for Structural Biology, Forschungszentrum Jülich

Апоферритин – уникальный белковый комплекс, обеспечивающий поглощение железа большинством живых организмов. Структура апоферритина глобулярная и состоит из 24 субъединиц, которые образуют 8 трёхфолдных каналов и 6 четырёхфолдных, при этом N-конец каждой субъединицы участвует в формировании одного трёхфолдного, а С-конец – четырёхфолдного канала соответственно. N-конец каждой субъединицы апоферритина расположен снаружи глобулы, а С-конец – внутри. В связи с такими структурными особенностями оказывается возможным создание химерных белков, пришитых к N-концу субъединиц апоферритина.

В данной работе разработаны протоколы сборки таких белковых комплексов методом рефолдинга белков из нерастворимой фракции после лизиса клеток *E.coli*, проведено исследование химерных белковых конструкций апоферритин-рецептор связывающий домен (RBD) S-белка SARS-Cov-2 методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). Анализ данных МУРР показал сборку октамера субъединиц апоферритин-рецептор связывающий домен (RBD) S-белка SARS-Cov-2.

Разработки химерных рекомбинантных белков, самособирающихся в глобулярные комплексы перспективны как с методологической точки зрения (исследования методом МУРР или малоуглового нейтронного рассеяния (МУРН)[1]), так и с точки зрения применимости в иммунологии (разработка белковых вакцин)[2] и фармакологии (доставка лекарственных препаратов)[3]. Методы МУРР и МУРН позволили осуществить контроль самосборки белковых комплексов, а также определить их олигомерное состояние в растворе[1, 4].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение # 075-00337-20-03, проект FSMG-2020-0003).

Литература

1. D. V Zabelskii et al., "Ambiguities and completeness of SAS data analysis: investigations of apoferritin by SAXS/SANS EID and SEC-SAXS methods," *J. Phys. Conf. Ser.*, vol. 994, no. 1, p. 012017, Mar. 2018.
2. M. Kanekiyo et al., "Self-assembling influenza nanoparticle vaccines elicit broadly neutralizing H1N1 antibodies," *Nature*, vol. 499, no. 7456, pp. 102–106, May 2013.
3. Z. Zhen et al., "RGD-modified apoferritin nanoparticles for efficient drug delivery to tumors," *ACS Nano*, vol. 7, no. 6, pp. 4830–4837, Jun. 2013.
4. T. N. Murugova et al., "Low resolution structural studies of apoferritin via SANS and SAXS: The Effect of concentration," *J. Optoelectron. Adv. Mater.*, vol. 17, no. 9–10, pp. 1397–1402, 2015.

Structural studies of self-assembling recombinant chimeric protein complexes based on apoferritin

A.V. Vlasov^{1,2,3}, A.D. Vlasova¹, Yu.L. Ryzhikau¹, N.A. Bondarev¹, S.V. Bazhenov¹, S.D. Osipov¹,
Yu.S. Semenov¹, V.V. Sudarev¹, A.I. Kuklin^{1,3}, V.I. Gordeliy^{1,4,5}

¹Moscow institute of physics and technology

²Institute of Crystallography, RWTH Aachen University

³Joint institute for nuclear research

⁴ Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes—Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives—CNRS

⁵ JuStruct: Jülich Center for Structural Biology, Forschungszentrum Jülich

Apoferritin is a unique protein complex that is responsible for iron absorption in most living organisms. The structure of apoferritin is globular and consists of 24 subunits, which form 8 three-fold channels and 6 four-fold channels. The N-terminus of each subunit is involved in the formation of one three-fold channel, and the C-terminus – a four-fold channel, respectively. The N-terminus of each apoferritin subunit is located outside the globule, and the C-terminus is inside. According to these structural features, it is possible to create chimeric proteins stitched to the N-terminus of apoferritin subunits.

In this work, we developed protocols for the assembly of such protein complexes by refolding proteins from the insoluble fraction after lysis of cells *E.coli*. We studied the chimeric protein constructs apoferritin-receptor binding domain (RBD) of the S-protein SARS-Cov-2 by small-angle X-ray scattering (SAXS). The analysis of the SAXS data showed the assembly of the octamer of the apoferritin receptor binding domain (RBD) subunit of the SARS-Cov-2 S protein.

The development of chimeric recombinant proteins that self-assemble into globular complexes are promising both from a methodological point of view (studies by SAXS or small-angle neutron scattering (SANS) [1]), and in terms of applicability in immunology (development of protein vaccines) [2] and pharmacology (drug delivery) [3]. The SAXS and SANS methods made it possible to control the self-assembly of the protein complexes, as well as to determine their oligomeric state in solution [1, 4].

The work was done with the support from the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (agreement # 075-00337-20-03, project FSMG-2020-0003).

Literature

1. D. V Zabelskii et al., “Ambiguities and completeness of SAS data analysis: investigations of apoferritin by SAXS/SANS EID and SEC-SAXS methods,” *J. Phys. Conf. Ser.*, vol. 994, no. 1, p. 012017, Mar. 2018.
2. M. Kanekiyo et al., “Self-assembling influenza nanoparticle vaccines elicit broadly neutralizing H1N1 antibodies,” *Nature*, vol. 499, no. 7456, pp. 102–106, May 2013.
3. Z. Zhen et al., “RGD-modified apoferritin nanoparticles for efficient drug delivery to tumors,” *ACS Nano*, vol. 7, no. 6, pp. 4830–4837, Jun. 2013.
4. T. N. Murugova et al., “Low resolution structural studies of apoferritin via SANS and SAXS: The Effect of concentration,” *J. Optoelectron. Adv. Mater.*, vol. 17, no. 9–10, pp. 1397–1402, 2015.

Филогенетический анализ семейства фотодекарбоксилаз жирных кислот

А.В. Алексенко, И.Ю. Гущин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Последние несколько десятилетий наблюдается повышенный исследовательский интерес в области фотокатализа. По сравнению с другими химическими методами, фотокатализ позволяет проводить реакции при более умеренных условиях, поскольку источником энергии является свет. В свою очередь, биокатализ является надежным и экологичным подходом в органическом синтезе. Таким образом, применение фотоэнзимов [1], т.е. ферментов, использующих свет, в биокаталитических реакциях, позволяет раскрыть преимущества обеих технологий. На данный момент, в природе известно 3 семейства фотоэнзимов с различными каталитическими активностями, одним из которых является семейство фотодекарбоксилаз жирных кислот (FAP). Данное семейство, недавно

обнаруженное в водорослях, имеет многообещающий потенциал для применения в сфере производства биотоплива [3].

Семейство FAP входит в еще более крупное суперсемейство белков оксидоредуктаз глюкозы-метанола-холина (GMC) [2]. Нами был проведен анализ природного разнообразия FAP и их положения относительно других подсемейств GMC, поскольку доменная структура FAP диктует необходимость исследовать их в контексте всего суперсемейства GMC. Анализ известных структур FAP и белков других подсемейств, позволил выделить один надежный молекулярный критерий для характеристики FAP: сильно консервативный гистидин в регионе активного сайта наблюдается у всех структур других подсемейств GMC, кроме FAP. В работе был проведен филогенетический анализ с реконструкцией эволюционного дерева всего семейства GMC и затем, только потенциальных белков FAP. Несколько кластеров белков были идентифицированы как маловероятные кандидаты FAP, а несколько таксонов, наоборот, как возможные новые FAP, ранее не проверенные экспериментально.

Мы показали, что в геномных и метагеномных базах данных есть более чем 200 возможных генов FAP, которые могут быть более стабильны, эффективны, или могут использовать субстрат с другими характеристиками и, что есть группы возможных оксидоредуктаз без охарактеризованных представителей [4]. Таким образом, наша работа показывает, что множество оксидоредуктаз с удивительными свойствами еще не изучены до конца, а какие-то еще могут быть обнаружены в природе.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (идентификатор проекта RFMEFI61720X0059)

Литература

1. Björn, L.O. Photoenzymes and Related Topics: An Update // *Photochem. Photobiol.* 2018, 94, 459–465.
2. Sützl, L.; et al. The GMC superfamily of oxidoreductases revisited:
3. Analysis and evolution of fungal GMC oxidoreductases // *Biotechnol. Biofuels* 2019, 12, 118.
4. Moulin, S.; et al. Fatty acid photodecarboxylase is an ancient photoenzyme responsible for hydrocarbon formation in the thylakoid membranes of algae // *bioRxiv* 2020.
5. Aleksenko, V.A.; Anand, D.; Remeeva, A.; Nazarenko, V.V.; Gordeliy, V.; Jaeger, K.-E.; Krauss, U.; Gushchin, I. Phylogeny and Structure of Fatty Acid Photodecarboxylases and Glucose-Methanol-Choline Oxidoreductases // *Catalysts* 2020, 10, 1072.

УДК 57.085.2

Характеризация биологической и оптической совместимости микроэлектродных матриц с пассивирующим слоем Al₂O₃ для электрофизиологических измерений нейронных культур

Е.О. Савельева^{1,2}, П.А. Стариков¹, Д.В. Негров¹, В.И. Горделий^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Исследовательский Центр Юлих

Пассивные устройства на основе микроэлектродных матриц являются широко используемым инструментом внеклеточной записи электрофизиологического сигнала с электрически активных клеток. Данный метод измерения активности культуры может как использоваться для изучения спонтанной активности нейронных культур, так и комбинироваться с различными методами стимуляции и модуляции электрической активности. В частности, микроэлектродные матрицы применяются в оптогенетических исследованиях, в основе которых лежит оптическая стимуляция генномодифицированных клеток со встроенным в плазматическую мембрану фотоактивным белком (родопсином). В рамках разработки гибридной системы, совмещающей оптическую стимуляцию и запись электрофизиологического сигнала на одном устройстве, был изготовлен тестовый образец измерительного чипа на основе микроэлектродной матрицы с применением материалов, обладающих необходимыми свойствами для будущей интеграции в оптоэлектрическое гибридное устройство. Микроэлектродная матрица состоит из 64 каналов, включающих в себя микроэлектроды диаметром 20 мкм с разводкой к внешним контактным площадкам [1]. В качестве металлизации для исследуемого чипа применялся стек из золота (инертного и биосовместимого металла с хорошими проводя-

щими свойствами) и адгезионного подслоя (хром или титан). В качестве материала для пассивирующего слоя был выбран оксид алюминия Al_2O_3 . Такой выбор обусловлен возможностью получения хороших изолирующих свойств при малой толщине пассивации (порядка 5 нм), обеспечивающей необходимую для интеграции с источниками стимулирующего излучения оптическую прозрачность слоя.

Была охарактеризована биосовместимость поверхности полученного устройства: при помощи метода кальцеинового окрашивания показана хорошая выживаемость и нормальное развитие нейронной культуры в течение не менее 3 недель с момента нанесения на чип (рис. 1). Для характеристики оптической совместимости устройства с источниками стимулирующего излучения для оптогенетики было проведено измерение электрического сигнала, вызванного фотоэффектом при воздействии лазерного излучения. Показано, что наименьший паразитный эффект наблюдается при использовании адгезивного слоя хрома, амплитуда такого сигнала ниже 1 мВ и позволит получить полезный сигнал непосредственно после стимулирующего импульса (рис. 2).

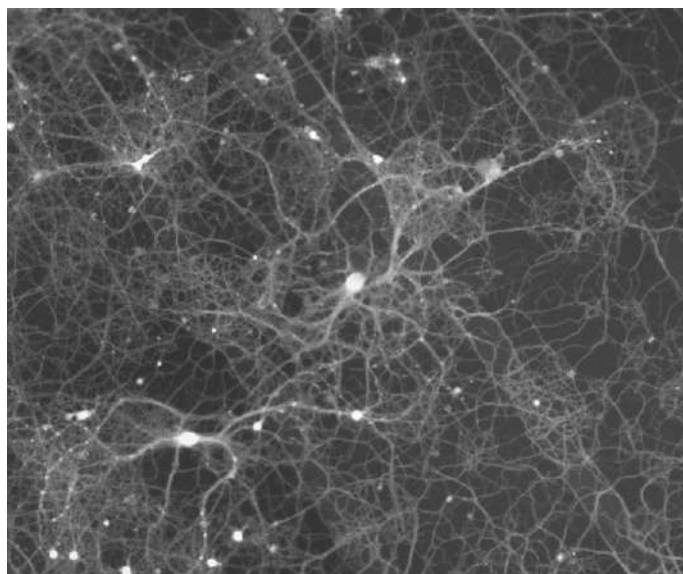


Рис. 1. Культура кортикальных нейронов на чипе (21 день *in vitro*), живые клетки визуализированы при помощи кальцеинового окрашивания

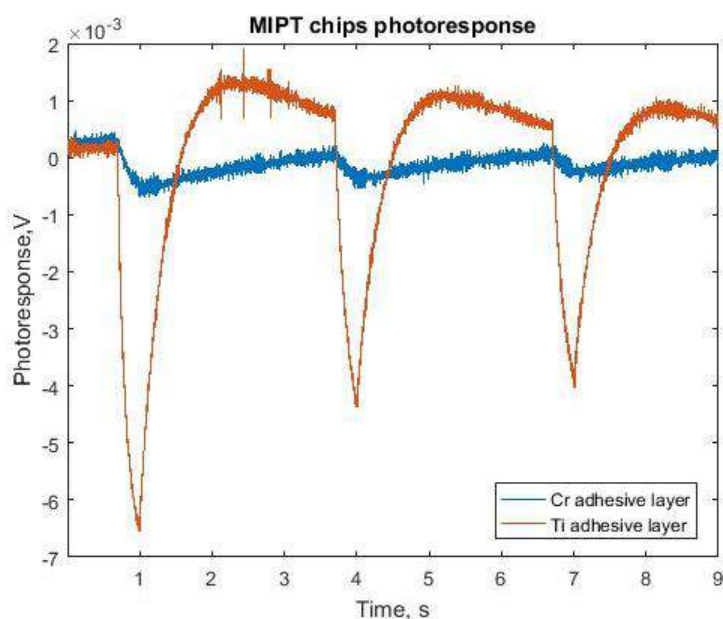


Рис. 2. Паразитный электрический сигнал с устройства записи при оптической стимуляции лазерным излучением

Литература

1. H Ecken, S Ingebrandt, M Krause, D Richter, M Hara, A Offenhäusser 64-Channel extended gate electrode arrays for extracellular signal recording // *Electrochimica acta* 48 (20-22), 3355-3362.

УДК 57.063.7

Черноморские изоляты светящихся морских бактерий принадлежат к новому виду *Vibrio aquamarinus* sp. nov

С.Б. Кузнецова¹, М.А. Сазыкина², С.А. Хрульнова^{3,4}, И.С. Сазыкин², В.А. Чистяков²,
И.В. Манухов^{1,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Южный федеральный университет

³Государственный научно-исследовательский институт генетики и селекции промышленных микроорганизмов

⁴Национальный научно-исследовательский центр гематологии

Род *Vibrio* состоит из десятков филогенетически, фенотипически и экологически изолированных видов, широко распространенных в окружающей среде. Представители рода *Vibrio* являются одними из наиболее распространенных организмов в поверхностных водах во всем мире [1, 2]. К роду *Vibrio* относятся штаммы, населяющие различные организмы, включая планктон и рыб, а также штаммы, обитающие на коже морских животных и в содержимом их кишечника, где микроорганизмы выступают в качестве симбионтов, паразитов или патогенов. Бактерии нескольких видов *Vibrio* могут вызывать заболевания у морских животных и людей [3,4].

Некоторые из видов *Vibrio* обладают способностью к биолюминесценции и достаточно широко распространены в морях и океане, особенно в умеренных и теплых водах [5]. Низкая соленость (около 18 промилле), хемоклиновое зонирование и другие гидробиологические особенности Черного моря наряду с его относительной изоляцией от Средиземного моря могут обуславливать появление в процессе эволюции черноморских эндемичных бактериальных видов. В работе охарактеризован новый вид биолюминесцентных бактерий, населяющих воды Черного моря.

Штаммы VNB-15^T и VNB-16 были выделены из вод Черного моря в районе Абрау-Дюрсо (44°40'36" с.ш., 37°33'49" в.д.). Пробы отбирались из поверхностного слоя воды на расстоянии 100 м от берега. Штамм SChm4 был изолирован из кишечника *Trachurus mediterraneus* подвид *ponticus*, выловленного у поселка Утес на берегу Южного Крыма (44 ° 59'97" с.ш., 34 ° 37'31" в.д.). Критерием отбора штаммов служила способность к биолюминесценции.

Таксономическое положение изолированных биолюминесцентных штаммов VNB-15^T, VNB-16 и SChm4 было определено с помощью филогенетического анализа, основанного на сравнении последовательностей восьми генов домашнего хозяйства (housekeeping genes) и последовательностей 16S rRNA [6].

В результате анализа, основанного на сравнении последовательностей генов 16S rRNA, штаммов VNB-15^T, VNB-16 и SChm4, была установлена их принадлежность к группе видов *Vibrio harveyi* в составе рода *Vibrio*.

В работе был проведен филогенетический анализ комбинированной последовательности восьми генов домашнего хозяйства (*gyrB*, *recA*, *pyrH*, *gapA*, *rpoA*, *mreB*, *ftsZ*, *topA*) с построением филогенетического дерева. По данным проведенного анализа было установлено, что обнаруженные штаммы VNB-15^T, VNB-16 и SChm4 образуют отдельный кластер от близкородственных видов *V. hyugaensis* и *V. jasicida* и принадлежат к новому виду рода *Vibrio* (рис. 1), который получил название *Vibrio aquamarinus*.

Vibrio aquamarinus (a.qua.ma'ri.nus. N.L. masc. adj. *aquamarinus* аквамарин - это цвет, представляющий собой голубоватый оттенок лазурного цвета, ближе к голубому, который относится к спектру испускаемого света). Типовой штамм: VNB-15^T (=VKPM B-11245^T =DSM 26054^T).

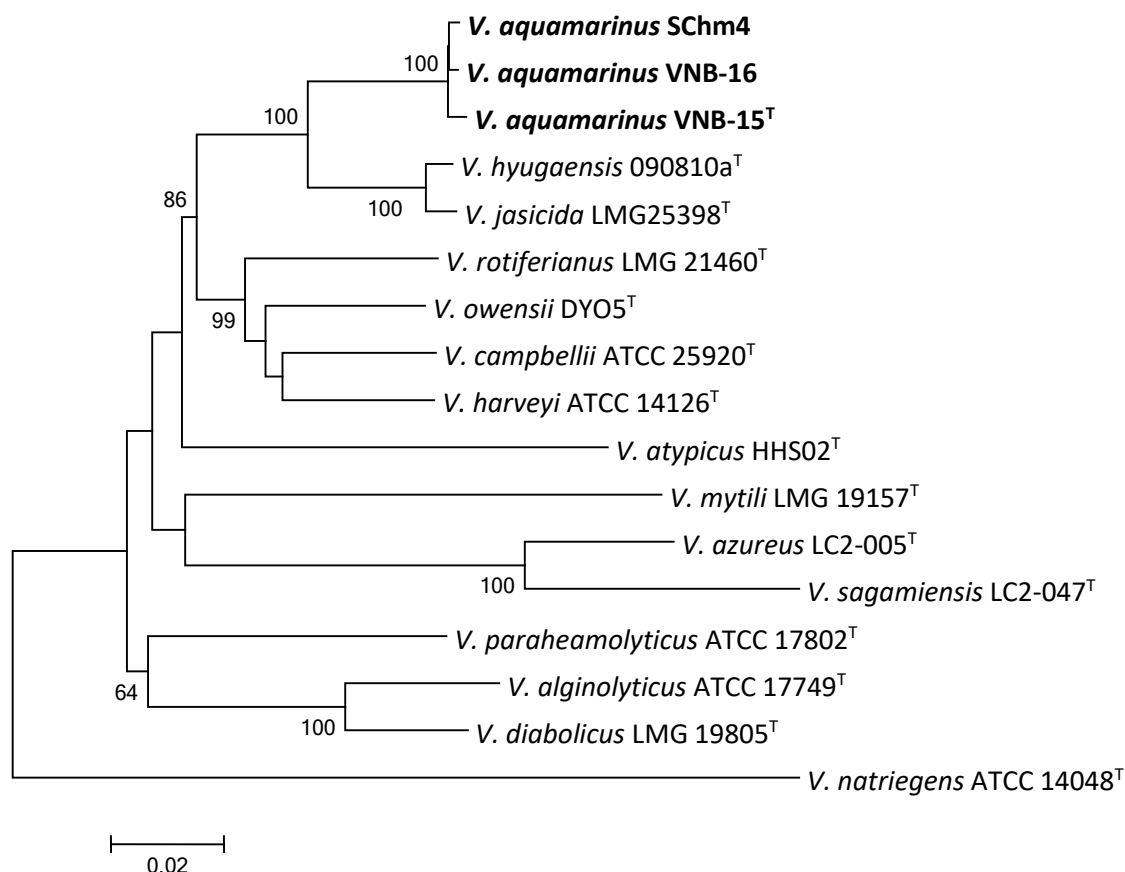


Рис.1. Филогенетическое дерево на основе анализа комбинированных последовательностей генов домашнего хозяйства *recA*, *gyrB*, *mreB*, *topA*, *ftsZ*, *pyrH*, *gapA*, в общей сложности 5600 bp, построенное методом Neighbor-Joining. Числа в узлах показывают вероятность образования кластера в процентах, определённое методом Bootstrap на основе 1000 повторов.

Литература

1. Thompson FL, Iida T, Swings J (2004). Biodiversity of *Vibrios*. Microbiol. Mol. Biol. Rev. 68, 403-431.
2. Farmer JJ, Janda JM, Brenner FW, Cameron DN & Birkhead KM (2005). Genus *Vibrio*. In Bergey's Manual of Systematic Bacteriology, 2nd edn, vol. 2B, pp. 494–546. Edited by Brenner DJ, Krieg NR & Staley JT. New York: Springer
3. Maugeri TL, Caccamo D, Gugliandolo C (2000). Potentially pathogenic *Vibrios* in brackish waters and mussels. J. Appl. Microbiol. 89, 261-266.
4. Ripabelli G, Sammarco ML, Grasso GM, Fanelli I, Caprioli A, Luzzi I (1999). Occurrence of *Vibrio* and other pathogenic bacteria in *Mytilus galloprovincialis* (mussels) harvested from Adriatic Sea, Italy. Int. J. Food Microbiol. 49, 43-48.
5. Dunlap PV & Kita-Tsukamoto K (2006). Luminous bacteria. The Prokaryotes, a handbook on the biology of bacteria, 3rd ed., vol.2, pp.863–892.
6. Sanger F, Nicklen S, Coulson AR (1977). DNA sequencing with chain-terminating inhibitors. Proc. Natl. Acad. Sci. 74, 5463-5468.

Секция квантовой теории информации

Председатель: В.И. Манько (д.ф.-м.н., профессор)
Зам. председателя: С.Н. Филиппов (к.ф.-м.н., доцент)
Секретарь: Г.Н. Семин

Дата: 24.11.2020 Время: 11:00

УДК 530.145

Вероятностное представление цифровых квантовых вычислений

А.С. Мاستюкова^{1,2}, В.И. Яшин^{1,2,3}, Е.О. Киктенко^{1,2,3}, А.К. Фёдоров^{1,2}

¹Российский квантовый центр

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

Одну из важнейших ролей в изучении фундаментальных аспектов квантовой физики и её возможных приложениях играет вопрос о наиболее подходящем описании динамики квантовых систем. В контексте приложений квантовой физики особый интерес представляет выявление роли неклассических явлений и понимание условий возникновения преимуществ использования квантовых систем в разнообразных приложениях, например, таких как квантовые коммуникации и квантовые вычисления [1-2].

В данной работе изучается возможность описания квантовой динамики с помощью псевдостохастических матриц, то есть матриц, суммы элементов столбцов которых равны 1, но, в отличие от стохастических матриц, не имеющих ограничения на неотрицательность элементов [3]. В рамках предлагаемого подхода данные матрицы действуют на вероятностные распределения (вероятностные векторы), полученные с помощью минимальных информационно-полных измерений [4]. Такой подход позволяет сохранить структуру тензорного произведения, что важно для описания многокубитных систем.

Мы продемонстрировали, что вероятностное представление квантовой динамики на основе минимальных измерений может быть использовано для анализа унитарной эволюции, описываемой уравнением фон Неймана, и для диссипативной эволюции квантовых систем, которая описывается уравнением Линдблада (также известном как ГКСЛ). Таким образом, такой подход полностью обобщает представление, основанное на симметричных измерениях [5]. В то же время важно иметь метод определения того, соответствуют ли распределение вероятностей и псевдостохастическое отображение квантовому каналу и квантовому состоянию соответственно. Мы представляем метод такой проверки.

Для иллюстрации предложенного подхода, мы получаем псевдостохастические отображения для основных каналов декогеренции, действующих на однокубитные и многокубитные квантовые системы (рис. 1).

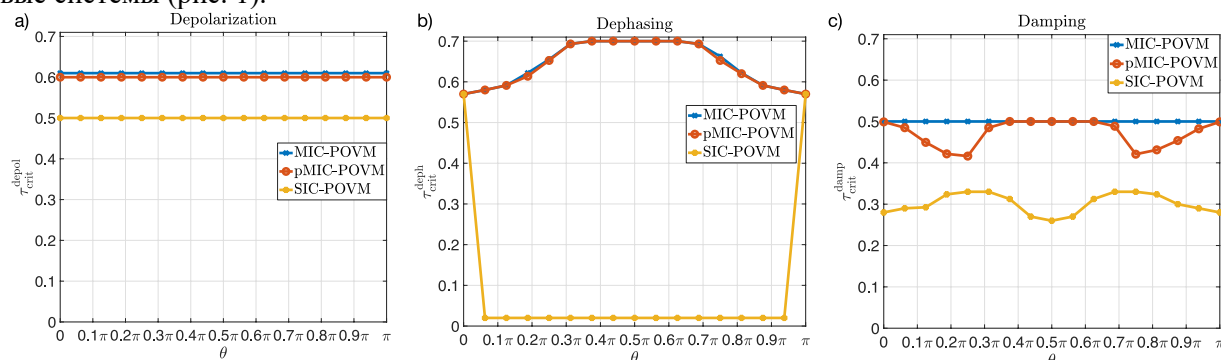


Рис. 1. Результаты численных расчетов характерного времени $\tau_{\text{crit}}^{\text{dec}}$, так что результирующая эволюция выглядит «классической» для трех различных каналов декогеренции и различных наборов минимальных измерений: (а) деполяризации, (b) дефазирования и (с) демпфирования.

Видно, что вероятностное представление на основе минимальных измерений предъявляет более строгие требования для выявления неклассического характера диссипативной квантовой динамики по сравнению с подходом на основе симметричных измерений.

Результаты данной работы дают физическую интерпретацию квантовых вычислений и открывают путь для изучения возможностей шумных квантовых устройств промежуточного масштаба (NISQ). Мы применяем вероятностное представление на основе минимальных информационно-полных измерений к модели цифровых квантовых вычислений: выводим представление для универсального набора вентилей для квантовых вычислений [6]. Это позволяет нам интерпретировать квантовые вычисления как действия псевдостохастических отображений в цепочке битов, где природа квантового ускорения связана с отрицательными элементами в псевдостохастических матрицах, которые соответствуют квантовому алгоритму (как последовательность вентилей и проективных измерений). В рамках такого подхода мы проиллюстрировали вероятностное представление для однокубитных (рис. 1) и многокубитных операций (рис. 2), а также для квантового алгоритма Гровера (рис. 3).

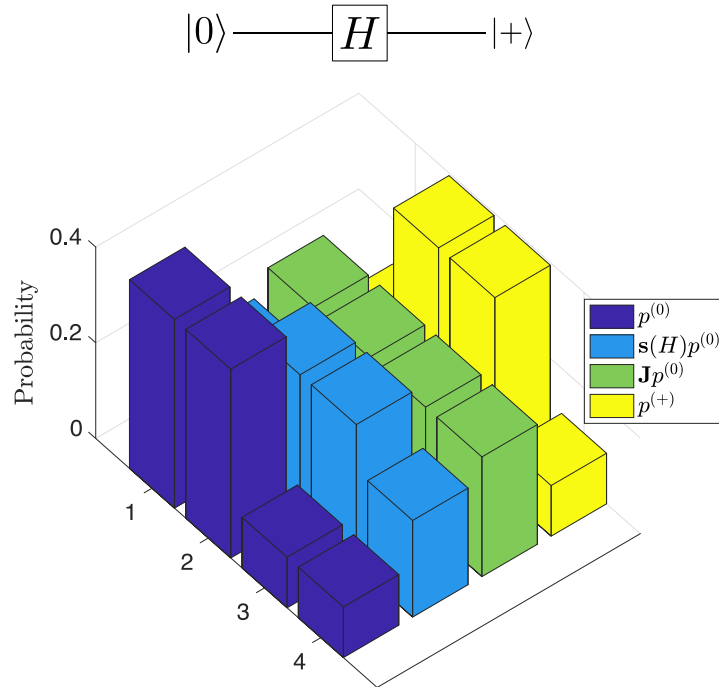


Рис. 2. Эволюция однокубитного состояния $|0\rangle$ в вероятностном представлении под действием вентилей Адамара.

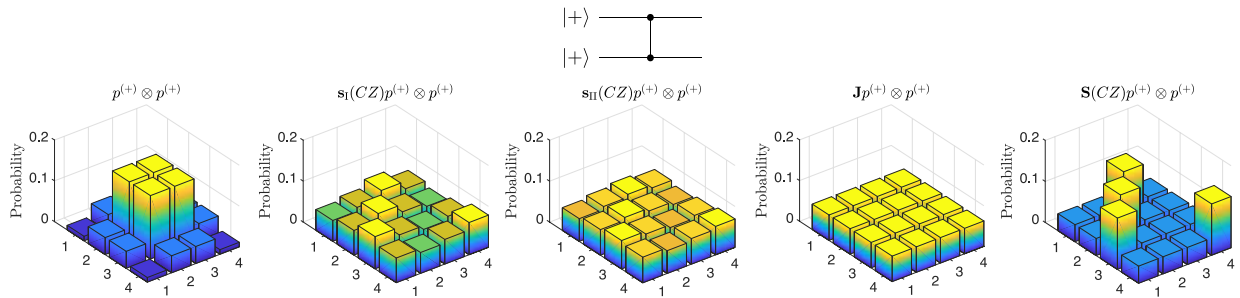


Рис. 3. Построение кластерного состояния в вероятностном представлении.

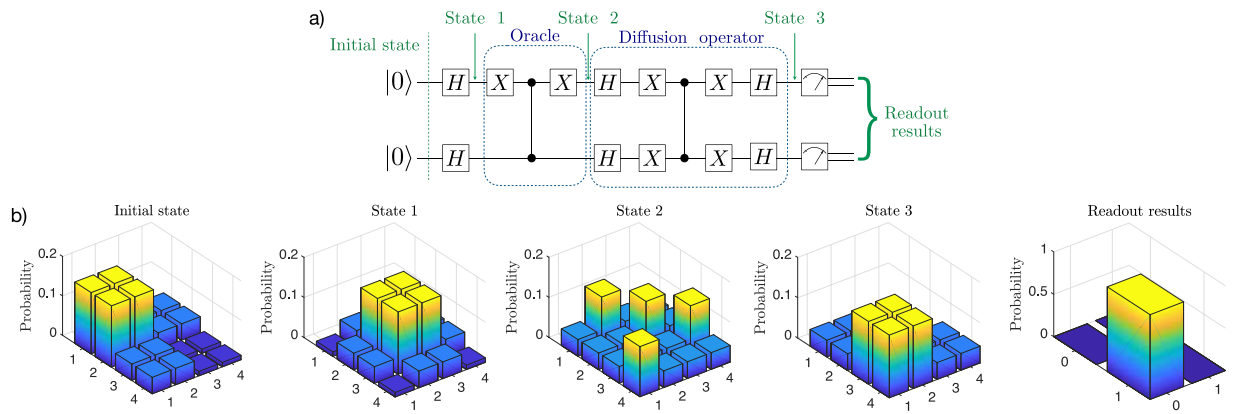


Рис. 4. Демонстрация алгоритма Гровера в вероятностном представлении. На (а) проиллюстрирована схема алгоритма Гровера. На (b) показана реализация алгоритма Гровера в вероятностном представлении.

Результаты этой работы были получены А.С.М. и А.К.Ф. при поддержке гранта РФФИ № 19-71-10092, а также результаты были получены В.И.Я. и Е.О.К. при поддержке гранта РФФИ № 19-71-10091.

Литература

1. Caves C.M., C.A. Fuchs C.A., Schack R. Unknown quantum states: the quantum de Finetti representation // J. Math. Phys. 2002. V. 43. P. 4537.
2. Jozsa R. An introduction to measurement based quantum computation // arXiv:quant-ph/0508124, 2005.
3. J.v.d. Wetering. Quantum theory is a quasi-stochastic process theory // EPTCS 2018. V. 266. P. 179.
4. Appleby M., Fuchs C.A., Stacey B.C., Zhu H. Introducing the qplex: a novel arena for quantum theory // Eur. Phys. J. D 2017. V. 71. P. 197.
5. Kiktenko E.O., Malyshev A.O., Mastiukova A.S., Man'ko V.I., Fedorov A.K., Chruściński D. Probability representation of quantum dynamics using pseudostochastic maps // Phys. Rev. A 2020. V. 101. P. 052320.
6. Yashin V.I., Kiktenko E.O., Mastiukova A.S., Fedorov A.K. Minimal informationally complete measurements for probability representation of quantum dynamics // Accepted to New J. Phys. 2020.

УДК 533.922

Информационные свойства приближённого измерения координаты

А.С. Холево¹, В.И. Яшин^{1,2}

¹Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящей работе производится анализ многомодовой гауссовой наблюдаемой приближённого измерения координаты. В квантовой оптике такая наблюдаемая соответствует шумному гомодинному детектированию. Доказано свойство «гауссовых оптимизаторов» для приращения энтропии этих наблюдаемых. С помощью этого свойства выведены различные аналитические выражения, в том числе рассчитана пропускная способность с использованием сцепленности. Подробно рассмотрен случай одной моды.

Рассмотрим наблюдаемую приближённого измерения координаты в случае бозонных мод. Она задаётся формулой

$$M(d^s x) = D(x) \exp\left(-\frac{1}{2} x^t \beta^{-1} x\right) D(x)^* \frac{d^s x}{\sqrt{(2\pi)^s \det(\beta)}}, \quad (1)$$

где – вещественная матрица ковариаций и – оператор смещения. При измерении наблюдаемой гауссова состояния с матрицей ковариаций получается распределение вероятностей

$$p_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^s \det(\alpha_{qq} + \beta)}} \exp\left(-\frac{1}{2} x^t (\alpha_{qq} + \beta) x\right). \quad (2)$$

Для инструментов вида

$$\mathcal{M}(A)[\rho] = \int_A V(x) \rho V(x)^* \mu(dx) \quad (3)$$

принято рассматривать *приращение энтропии*

$$ER(\rho, M) = H(\rho) - \int_{\Omega} p_{\rho}(x) H(\hat{\rho}(x)) \mu(dx) \quad (4)$$

В работе показано, что приращение энтропии при измерении рассматриваемой наблюдаемой равно

$$ER(\rho_{\alpha}, M) = \frac{1}{2} \left[Sp g \left(abs(\Delta^{-1} \alpha) - \frac{I_{2s}}{2} \right) - Sp g \left(abs(\Delta^{-1} \hat{\alpha}) - \frac{I_{2s}}{2} \right) \right], \quad (5)$$

где $\hat{\alpha}$ – матрица ковариаций выходного состояния, $g(x) = (x+1) \log(x+1) - x \log(x)$. При этом приращение энтропии на классе операторов со вторым моментом достигает максимума на центрированном гауссовом состоянии.

В случае одной моды $s=1$ приращение энтропии равно

$$ER(\rho_{\alpha}, M) = g \left(\sqrt{\alpha_{qq} \alpha_{pp} - \alpha_{qp}^2} - \frac{1}{2} \right) - g \left(\sqrt{\frac{\alpha_{qq}(\beta \alpha_{pp} + 1/4) - \beta \alpha_{qp}^2}{\alpha_{qq} + \beta}} - \frac{1}{2} \right). \quad (6)$$

Пропускная способность с использованием сцепленности C_{ea} при гамильтониане $H = \frac{1}{2}(q^2 + p^2)$ и ограничении на энергию задаётся как

$$C_{eq}(M, H, E) = \max ER(\rho_{\alpha}, M), \quad (7)$$

где максимум берётся по $Tr(\rho_{\alpha} H) \leq E$. График пропускной способности в зависимости от ограничения энергии изображён на рисунке 1.

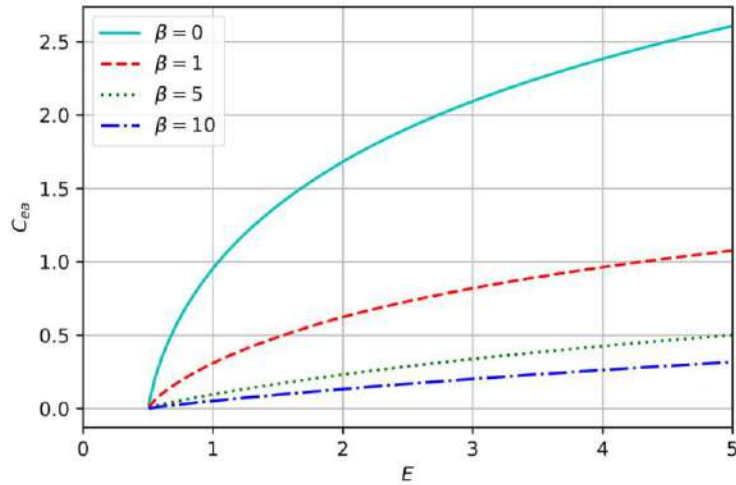


Рис.1. График зависимости пропускной способности с использованием сцепленности C_{ea} от энергии E при $\beta=0, 1, 5, 10$.

Полученные результаты представляют интерес с точки зрения фундаментальных вопросов развития квантовой теории передачи информации.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-11-00086.

Литература

1. M. Berta, J. M. Renes, M. M. Wilde Identifying the information gain of a quantum measurement // IEEE Trans. Inform. Theory 2014. V. 60. N. 12. P. 7987-8006.
2. C.M. Caves, P.D. Drummond Quantum limits on bosonic communication rates // Rev. Mod. Phys. 1994. V. 68 N. 2. P. 481-537.
3. A.S. Holevo, A.A. Kuznetsova Information capacity of continuous variable measurement channel // J. of Phys. A 2020. V. 53. N. 17. P. 175304
4. A.S. Holevo Information capacity of quantum observable // Problems of Inf. Trans. 2012. V. 48. P. 1-10

Использование псевдостохастического представления для симуляции квантовых процессов

Д.А. Куликов^{1,2}, В.И. Яшин^{1,2,3}, А.С. Мاستюкова^{1,2}, Е.О. Киктенко^{1,2,3}, А.К. Фёдоров^{1,2}

¹Российский квантовый центр

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

Важную роль в изучении квантовой физики играет вопрос об описании динамики квантовых систем. Особенно интересным является вопрос, какие преимущества дает неклассическая природа некоторых явлений в квантовых вычислениях [1-2].

В данной работе изучается возможность описания динамики квантовой системы с помощью псевдостохастических матриц. Это действительные матрицы, в которых суммы элементов столбцов равны 1, а сами элементы могут быть любого знака. [3]. В рамках этого подхода данные матрицы действуют на распределения вероятностей, полученные посредством минимальных информационно-полных измерений [4]. Ранее была продемонстрирована пригодность вероятностного формализма на основе минимальных измерений для описания эволюции открытых и закрытых квантовых систем в случае симметричных информационно полных измерений [5]. С помощью вероятностного представления можно ввести универсальный набор квантовых вентилях, что делает его применимым для описания квантовых алгоритмов [6].

Также важно понимать, возможно ли описывать квантовую эволюцию классическими способами, т.к. это дает возможность эффективной симуляции квантовой системы на классическом компьютере. Нами была предпринята попытка аппроксимировать псевдостохастические матрицы стохастическими и сравнить результирующие действия этих матриц. Анализировались случайные цепи (random circuit), также рассмотренные в эксперименте Google по демонстрации квантового превосходства [7].

Поиск ближайшей стохастической матрицы производился тремя способами: занулением отрицательных элементов с последующей перенормировкой столбцов, поиском для каждого столбца исходной матрицы ближайшего к нему столбца с неотрицательными элементами с помощью алгоритма SLSQP, и вычислением новой матрицы с помощью добавления матрицы пропорциональной единичной.

Результаты сравнения стохастической и псевдостохастической эволюции были представлены в виде расстояния между полученными вероятностными векторами (рис. 1), результатов XEB (Cross Entropy Benchmark) [7] (рис. 2), который определяет степень «квантовости» действия случайной цепи, а также, с помощью статистической выборки итоговых распределений вероятностей после действия случайной цепи (рис. 3). Из полученных результатов можно сделать вывод, что простое превращение матриц в стохастические недостаточно эффективно, и надо искать более продвинутые способы симуляции квантовых вычислений в терминах псевдостохастических матриц.

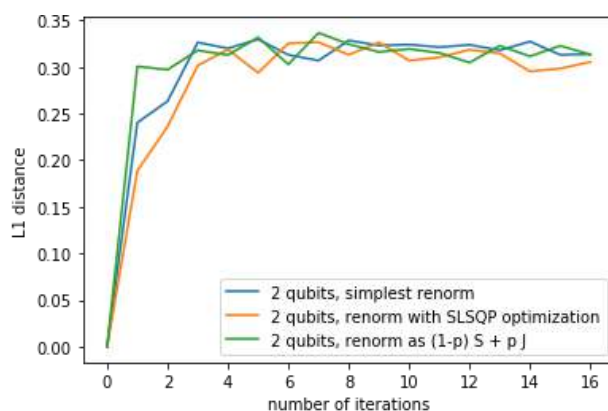


Рис. 1. Сравнение действия псевдостохастических и соответствующих им стохастических отображений при трех различных способах перенормировки.

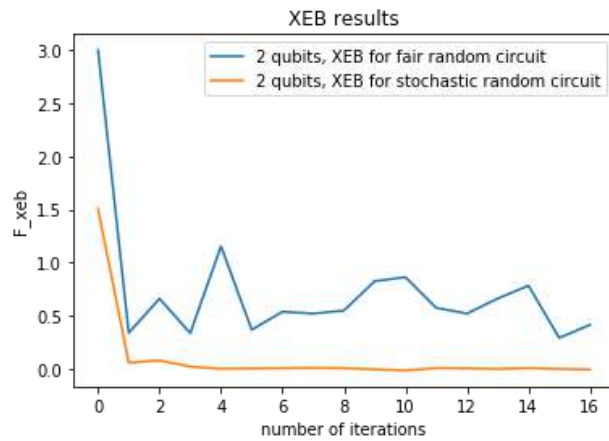


Рис. 2. Результаты ХЕВ для истинно случайной цепи и цепи, состоящей из соответствующих стохастических матриц. По оси ординат показана fidelity цепи, по оси абсцисс- количество итераций случайной цепи.

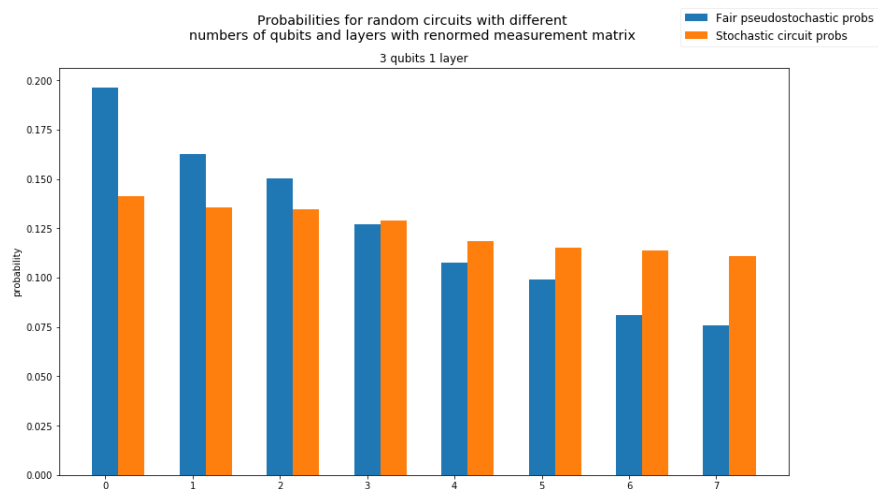


Рис. 3. Статистическая выборка распределения вероятностей случайной цепи для трех кубитов и соответствующей ей цепи из стохастических матриц. Степень «классичности» цепи определяется близостью к равномерному распределению вероятностей.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-71- 10091

Литература

1. *Caves C.M., C.A. Fuchs C.A., Schack R.* Unknown quantum states: the quantum de Finetti representation // J. Math. Phys. 2002. V. 43. P. 4537.
2. *Jozsa R.* An introduction to measurement based quantum computation // arXiv:quant-ph/0508124, 2005.
3. *J.v.d. Wetering.* Quantum theory is a quasi-stochastic process theory // EPTCS 2018. V. 266. P. 179.
4. *Appleby M., Fuchs C.A., Stacey B.C., Zhu H.* Introducing the qplex: a novel arena for quantum theory // Eur. Phys. J. D 2017. V. 71. P. 197.
5. *Kiktenko E.O., Malyshev A.O., Mastiukova A.S., Man'ko V.I., Fedorov A.K., Chruściński D.* Probability representation of quantum dynamics using pseudostochastic maps // Phys. Rev. A 2020. V. 101. P. 052320.
6. *Yashin V.I., Kiktenko E.O., Mastiukova A.S., Fedorov A.K.* Minimal informationally complete measurements for probability representation of quantum dynamics // to appear in New J. Phys. 2020.
7. *Martinis J.M. [et al.]* Quantum supremacy using a programmable superconducting processor // Nature 2019. V. 584 P. 505

Исследование квантовой системы, находящейся под воздействием случайного телеграфного шума, на основе методов машинного обучения

Г. Н. Семин^{1,2}, С. Н. Филиппов^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук

³Физико-технологический институт им. К. А. Валиева Российской академии наук

Различные источники шумов могут оказывать влияние на открытые квантовые системы, меняя характер их динамики и усложняя их исследование [1]. В данной работе рассматривается квантовая система с размерностью $d_S = 2$, находящая под воздействием случайного телеграфного шума. В качестве примера рассмотрим сверхпроводящий зарядовый кубит S , взаимодействующий с дефектом M – фермионной ловушкой, которая в свою очередь захватывает электроны из разрешенной зоны диэлектрика. В зависимости от заполненности ловушки из-за кулоновского взаимодействия меняется гамильтониан кубита, а дефект является источником случайного телеграфного шума [2]. При этом, из-за действия дефекта характер динамики кубита как динамика открытой квантовой системы становится немарковской, тогда как динамика составной системы $S + M$ является марковской.

Уравнение движения для системы $S + M$ задается следующим образом:

$$\frac{d}{dt}\rho_{SM} = \mathcal{L}_{true}[\rho_{SM}] = -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{\epsilon}{2} I_S \otimes \sigma_{zM} + K_S \otimes \sigma_{zM}, \rho_{SM} \right] + \mathcal{D}[\rho_{SM}] \quad (1)$$

где $\rho_{SM} \in S(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_M)$, ϵ – энергетическая разность между двумя состояниями дефекта, I_S – единичная матрица размера $d_S \times d_S$, σ_{zM} – матрица Паули z . K_S – эрмитова матрица размера $d_S \times d_S$, которая параметризуется следующим образом:

$$K_S = \alpha \sigma_x + \beta \sigma_y + \gamma \sigma_z, \quad (2)$$

где коэффициенты α, β, γ – произвольные действительные числа. Через них определяется частота

$$\omega = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2}. \quad (3)$$

$\mathcal{D}[\rho_{SM}]$ – диссипативная часть, задающаяся следующим выражением:

$$\mathcal{D}[\rho_{SM}] = \Gamma_+ \left(\sigma_{M+} \rho_{SM} \sigma_{M-} - \frac{1}{2} \{ \sigma_{M-} \sigma_{M+}, \rho_{SM} \} \right) + \Gamma_- \left(\sigma_{M-} \rho_{SM} \sigma_{M+} - \frac{1}{2} \{ \sigma_{M+} \sigma_{M-}, \rho_{SM} \} \right). \quad (4)$$

Здесь $\sigma_{M\pm} = I_S \otimes \sigma_{\pm}$, $\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y$, $\Gamma_{\pm}$ – скоростные коэффициенты захвата и высвобождения электрона из ловушки. Связь между скоростными коэффициентами задается через $\frac{\Gamma_-}{\Gamma_+} = \exp\left(\frac{\epsilon}{kT}\right)$, где T – электронная температура. Корреляционное время телеграфного шума задается через $2/t_c = \Gamma_+ + \Gamma_-$.

Собственные значения линдбладана (1) следующие:

$$\lambda = 0, \quad (5a)$$

$$\lambda = -\frac{2}{t_c}, \quad (5b)$$

$$\lambda = -\frac{1}{t_c} + i\epsilon, \quad (5c)$$

$$\lambda = -\frac{1}{t_c} - i\epsilon, \quad (5d)$$

$$\lambda = -\frac{1}{t_c} + i(\epsilon + 2\omega), \quad (5e)$$

$$\lambda = -\frac{1}{t_c} + i(\epsilon - 2\omega), \quad (5f)$$

$$\lambda = -\frac{1}{t_c} - i(\epsilon + 2\omega), \quad (5g)$$

$$\lambda = -\frac{1}{t_c} - i(\epsilon - 2\omega), \quad (5h)$$

$$\lambda = -\frac{1}{t_c} + i\sqrt{\frac{1}{t_c^2} - 4\omega^2 + 4i\hbar\left(\frac{\epsilon}{kT}\right)}, \quad (5i)$$

$$\lambda = -\frac{1}{t_c} - i\sqrt{\frac{1}{t_c^2} - 4\omega^2 + 4i\hbar\left(\frac{\epsilon}{kT}\right)}, \quad (5j)$$

$$\lambda = -\frac{1}{t_c} + i\sqrt{\frac{1}{t_c^2} - 4\omega^2 - 4i\hbar\left(\frac{\epsilon}{kT}\right)}, \quad (5k)$$

$$\lambda = -\frac{1}{t_c} - i\sqrt{\frac{1}{t_c^2} - 4\omega^2 - 4i\hbar\left(\frac{\epsilon}{kT}\right)}, \quad (5l)$$

При этом, собственные значения (5a), (5b), (5c), (5d) соответствуют собственным подпространствам размерностью 2.

Предлагается метод исследования динамики кубита, находящегося под воздействием случайного телеграфного шума. В этом методе используется алгоритм, основанный на методах машинного обучения, который восстанавливает на основе проективных измерений над системой ее динамику путем обучения линдбладана [3]. Обученный линдбладан имеет вид

$$\frac{d}{dt}\rho_{SM} = \mathcal{L}_{train}[\rho_{SM}] = \mathcal{L}_{true}[\rho_{SM}] + \mathcal{D}_{irrel}[\rho_{SM}], \quad (6)$$

где иррелевантная диссипативная часть задается выражением

$$\mathcal{D}_{irrel}[\rho_{SM}] = A \left(\sigma_{\uparrow} \rho_{SM} \sigma_{\downarrow} - \frac{1}{2} \{ \sigma_{\downarrow} \sigma_{\uparrow}, \rho_{SM} \} \right) + A^* \left(\sigma_{\downarrow} \rho_{SM} \sigma_{\uparrow} - \frac{1}{2} \{ \sigma_{\downarrow} \sigma_{\uparrow}, \rho_{SM} \} \right). \quad (7)$$

Здесь $\sigma_{\uparrow} = I_S \otimes \frac{1}{2}(I + \sigma_z)$, $\sigma_{\downarrow} = I_S \otimes \frac{1}{2}(I - \sigma_z)$, A – комплексное число, определяющееся через начальные параметры алгоритма и последовательность проективных измерений, поданные на вход. Данная добавка не вносит вклад в динамику для начальных состояний вида $\rho = \rho_S \otimes \rho_M^{th}$, где $\rho_S \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_S)$, $\rho_M^{th} = \text{tr}_M(\lim_{t \rightarrow \infty} e^{\mathcal{L}_{train} t}[\rho_0])$, $\rho_0 \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E)$, поскольку термализованное состояние дефакта имеет вид $\rho^{th} = \frac{I + a\sigma_z}{2}$, где $a \in [-1, 1]$, и при подстановке выражение (7) равно нулю. Собственные числа (5a), (5b), (5i)–(5l) совпадают для линдбладанов (1) и (7).

Метод состоит из следующих шагов. Над системой, подчиняющейся динамике (1), проводятся две серии проективных измерений. Далее, алгоритм дважды восстанавливает динамику, основываясь на двух проведенных сериях проективных измерений и начиная с разных начальных параметров. После этого проводится анализ двух линдбладанов на собственные числа, и из них отбираются совпадающие величины. Среди них находятся действительные числа, которые соответствуют собственным значениям (5b), и находится корреляционное время t_c . Оставшиеся ненулевые значения относятся к собственным значениям (5i) – (5l), и через них находятся частота ω и $\frac{\epsilon}{kT}$. Матрица K_S восстанавливается через термализованное состояние системы S , нормированный вектор Блоха которого имеет вид

$$\vec{r} = \frac{1}{\omega} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Таким образом, из имеющейся информации восстанавливается матрица K_S и скоростные коэффициенты Γ_+ , Γ_- .

Работа поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС», проект 19-1-2-66-1.

Литература

1. Cai X. Quantum dephasing induced by non-Markovian random telegraph noise // Sci. Rep. 2020. V. 10
2. O.-P. Saira, Bergholm V., Ojanen T., Möttönen M. Equivalent qubit dynamics under classical and quantum noise // Phys. Rev. A. 2007. V. 75. P. 012308
3. Лучников И.А., Семин Г.Н., Филиппов С.Н. Реконструкция немарковской динамики открытой квантовой системы методами машинного обучения // Труды 62-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 18-24 ноября 2019 года. Фундаментальная и прикладная физика. с. 393

Исследование модели Швингера с помощью нейронных сетей

Е.В. Петрова^{1,2}, Е.С. Тиунов^{1,2}, А.К. Федоров^{1,2}

¹Российский квантовый центр

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Одним из основных применений квантовых вычислительных устройств является изучение сложных моделей, возникающих в различных областях физики, например, в физике конденсированного состояния и физике высоких энергий. Недавние работы [1,2] показали возможность изучения модели Швингера с помощью квантовых симуляторов. Кроме того, активно развивающейся сферой является применение для анализа физических систем методов машинного обучения. В данной работе проводится сравнение результатов изучения модели Швингера с помощью квантового симулятора [1] и подхода, основанного на машинном обучении.

Модель Швингера описывается следующим гамильтонианом в калибровке $A_0 = 0$

$$H = -i\bar{\psi}\gamma^1(\partial_1 - igA_1)\psi + m\bar{\psi}\psi + \frac{1}{2}E^2$$

После представления на решетке и преобразовывая поля в спинорные операторы гамильтониан принимает следующую форму

$$H = w \sum_n^{N-1} (\sigma_n^+ \sigma_{n+1}^- + \sigma_{n+1}^+ \sigma_n^-) + \frac{m}{2} \sum_{n=1}^N (-1)^n \sigma_n^z + \bar{g} \sum_{n=1}^{N-1} (\epsilon_0 - \frac{1}{2} \sum_{l < n} (\sigma_n^z + (-1)^l))^2$$

где $w = 1/2a$, $\bar{g} = g^2 a/2$, где a — шаг решетки. Так как гамильтониан состоит из произведения спинорных операторов, мы можем представить гамильтониан в кубитном базисе.

Нашей задачей является описание системы при низких температурах. В таких условиях основное состояние содержит полное описание системы. Для нахождения основного состояния мы использовали полносвязную нейронную сеть, которая отображает спинорную конфигурацию в комплексную амплитуду. В качестве функции потерь использовалось среднее значение гамильтониана.

С помощью нейронной сети было получено значение основного уровня энергии для 8 кубитов, $m = 0.1$, $w = \bar{g} = 1$, и проведено сравнение с экспериментальными результатами, полученными на квантовом симуляторе [1] и точной диагонализацией гамильтониана

Квантовый симулятор	-3.24 ± 0.36
Нейронная сеть	-3.45945
Точное решение	-3.45945

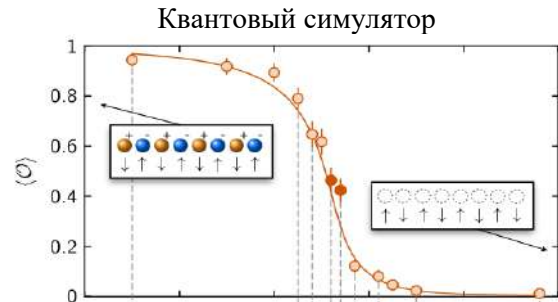
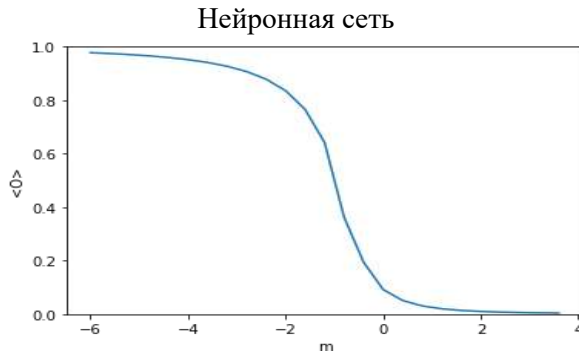
Кроме того, нейронная сеть позволила качественно пронаблюдать фазовый переход, измерив наблюдаемую O :

$$\langle O \rangle = \frac{1}{2N(N-1)} \sum_{i,j>i} \langle (1 + (-1)^i \sigma_i^z)(1 + (-1)^j \sigma_j^z) \rangle$$

$$\langle O \rangle = \frac{\sum \exp(-\beta E_n) \langle n | O | n \rangle}{\sum \exp(-\beta E_n)}$$

В пределе низких температур $\beta \rightarrow \infty$ основной вклад вносит член $\exp(-\beta E_0)$ и, следовательно, среднее значение наблюдаемой определяется основным состоянием.

В дальнейшем планируется изучить спектр модели Швингера [3] в непрерывном пределе, используя подход нейронных сетей.



Работа поддержана грантом РФФИ 19-71-10092.

Литература

1. Kokail C. et al. Self-verifying variational quantum simulation of lattice models //Nature. – 2019. – Т. 569. – №. 7756. – С. 355-360.
2. Borzenkova O. V. et al. Variational Simulation of Schwinger's Hamiltonian with Polarisation Qubits //arXiv preprint arXiv:2009.09551. – 2020.
3. Bañuls M. C. et al. The mass spectrum of the Schwinger model with matrix product states //Journal of High Energy Physics. – 2013. – Т. 2013. – №. 11. – С. 158.

УДК 530.145

Квантовое преимущество с использованием гибридного алгоритма для решения систем линейных уравнений

М.Р. Перельштейн^{1,2,3}, А.И. Пахомчик^{1,2}, А.А. Мельников^{1,2}

¹Terra Quantum AG

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³QTF Centre of Excellence, Department of Applied Physics, Aalto University School of Science

Целью данной работы была реализация практически полезной задачи на квантовом компьютере и демонстрация преимуществ квантового подхода по сравнению с классическим. Нами была выбрана задача решения систем линейных уравнений (1) с помощью известного алгоритма Харроу–Хасидим–Ллойда (ННЛ) [1]. Мы экспериментально решили систему из 2^{17} уравнений, что является рекордом для решения систем на квантовом компьютере. Кроме того, анализ алгоритма на более крупных масштабах продемонстрировал возможность достижения квантового преимущества.

Рассматриваемая система уравнений следующая:

$$\begin{cases} \frac{1}{2\pi i} \log(U) \vec{x} = \vec{b} \\ \rho\left(\frac{1}{2\pi i} \log(U)\right) < 1 \end{cases} \quad (1)$$

где U и $\vec{b}$ – заданные унитарная матрица и вектор. Структура уравнений отличается от стандартного вида $A\vec{x} = \vec{b}$, т.к. в алгоритме ННЛ, который мы используем, требуется разложение матричной экспоненты по гейтам, что является само по себе трудной задачей. Кроме того, вторая формула фиксирует спектральный радиус для того, чтобы $\log(U)$ был определен однозначно.

Основной идеей было задание U с помощью одно-кубитовых операций и гейтов CNOT. Кроме того, мы подобрали их так, что одна из самых трудоемких частей ННЛ-алгоритма QPE (quantum phase estimation) сильно упрощалась. По итогу, мы выделили 3 класса унитарных матриц U :

- 1) TP1 : где U – тензорное произведение одно-кубитовых гейтов.
- 2) TP2 : U – тензорное произведение двух-кубитных кластеров, внутри которых кубиты запутаны.
- 3) NTP : в U все кубиты связаны.

Для того, чтобы оценить точность работы нашего алгоритма была введена линейная кросс-энтропийная фиделити [2], для вычисления которой достаточно провести Z-проективное измерение и которая на больших масштабах с хорошей точностью совпадает с обычной фиделити:

$$F_{xeb} = \frac{\sum_{j=1}^M (\vec{p}_j^e - \vec{p}^u, \vec{p}_j^t)}{\sum_{j=1}^M (\vec{p}_j^e - \vec{p}^u, \vec{p}_j^t)}$$

где $\vec{p}_j^e$ и $\vec{p}_j^t$ – экспериментальные и теоретические вектора из вероятностей при измерении в Z-базисе в j-ом эксперименте, соответственно. $\vec{p}^u$ – вектор вероятностей из равномерного распределения.

Для сравнения эффективности квантовых компьютеров и самых мощных классических суперкомпьютеров в истории мы рассчитали время решения поставленной задачи на квантовом компьютере T_q , которое для всех цепей было практически одинаковым и равным времени развертки цепи. Кроме того, мы находили точность такого решения F_{xeb} . Было получено, что самым быстрым (с временем выполнения T_{cl}) и эффективным решением для классического компьютера будет симуляция квантовой цепи. В работе [2] было показано, что время классического решения с конечной точностью F_{xeb} прямо пропорционально этой точности. Таким образом, мы сравнивали следующие величины:

$$T_q \text{ vs } T_{cl} * F_{xeb}$$

На рис. 1 представлены результаты этого сравнения. Решение системы из 2^{17} уравнений на квантовом процессоре IBMQ Johannesburg оказалось быстрее, чем решение с такой же точностью на суперкомпьютерах прошлого столетия (ASCI Red, Cray-2 и другие). Кроме того, по нашим оценкам, при числе уравнений больше, чем 2^{55} , квантовый компьютер нового поколения Sycamore должен справляться с задачей быстрее, чем самый мощный современный суперкомпьютер Summit.

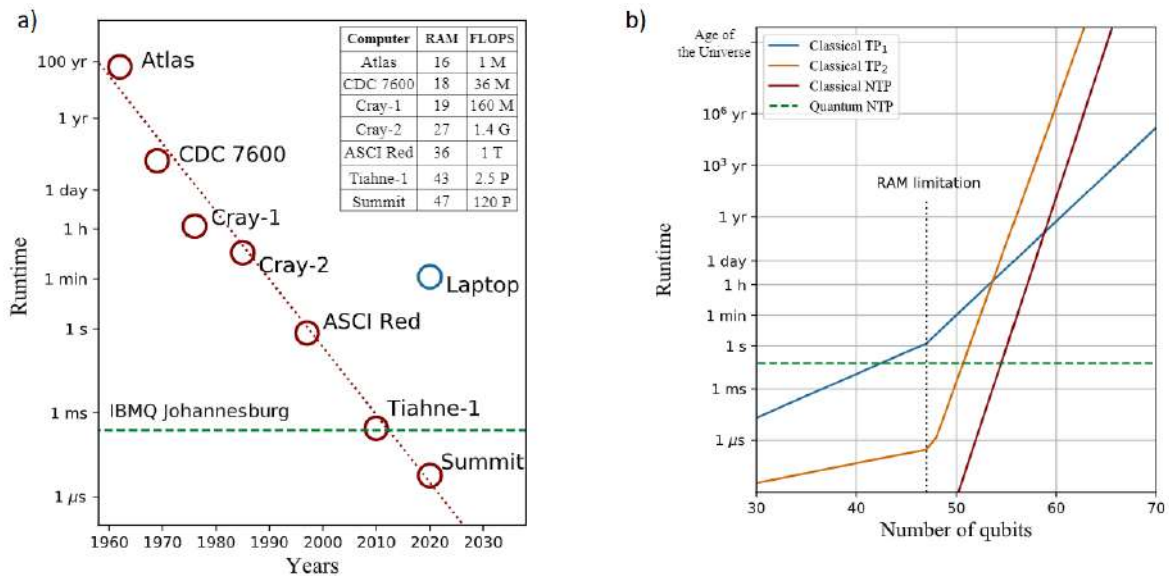


Рис. 1. (a) Сравнение времени решения системы из 2^{17} уравнений с заданной точностью на различных суперкомпьютерах. (b) Оценка времени классического решения различных классов систем линейных уравнений в зависимости от размера задачи. Зеленой линией указано время решения произвольной системы на квантовом компьютере Sycamore. Пунктирной серой линией обозначено число кубитов, при котором вектор состояния не может поместиться в оперативную память самого мощного суперкомпьютера Summit.

Литература

1. Harrow A. W., Hassidim A., Lloyd, S. Quantum algorithm for linear systems of equations // Phys. Rev. L. 2009
2. Arute F. et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor // Nature 2019

Квантово-оптическая томография в непрерывных переменных с помощью машинного обучения

Н.С. Кузнецов^{1, 2}, Е.С. Тиунов^{1, 2}, А.И. Львовский^{2, 3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Российский квантовый центр

³Оксфордский университет

Гомодинное детектирование является важным методом изучения различных квантово-оптических состояний, позволяющим измерять малые амплитуды электромагнитного поля. В квантовой механике мода электромагнитного поля эквивалентна гармоническому осциллятору, и в таком случае речь идет об измерении квадратуры $X_\theta = X \cos \theta + P \sin \theta$, где переменная θ задает систему отсчета и в эксперименте соответствует так называемой фазе локального осциллятора. Однако сами результаты подобного измерения $\{X_{\theta_i}\}$ в зависимости от $\{\theta_i\}$ требуют дальнейшей обработки с целью реконструкции матрицы плотности или функции Вигнера исходного состояния. Кроме стандартного использования обратного преобразования Радона, подобная процедура может быть численно проведена различными более эффективными способами, например, с помощью метода максимизации правдоподобия [1] или с использованием машинного обучения [2].

Обычно при численной реконструкции состояния используется фокковский базис, ограниченный сверху некоторым числом фотонов N , что обусловлено относительной легкостью вычислений и отсутствием многофотонных состояний в экспериментах. Подобный подход не позволяет точно восстанавливать состояния, если они содержат многофотонные компоненты, как состояния кошек Шредингера при больших амплитудах, или имеют сложную структуру, как GKP-состояния. В данной работе предложен метод восстановления матриц плотности сразу в координатном базисе, что позволяет преодолеть указанные сложности.

Имея набор фаз и измеренных квадратур $\{\theta_i, X_{\theta_i}\}$ восстановить состояние можно с помощью максимизации правдоподобия, что эквивалентно минимизации функционала вида:

$$L = -\sum_i \ln[W(X_{\theta_i}, \theta_i)].$$

Вероятность W измерения некоторой квадратуры X_θ в состоянии ρ выражается следующей формулой [3]:

$$W(X, \theta) = \frac{1}{2\pi|\sin\theta|} \iint \rho(u, v) \exp\left\{-i \frac{u-v}{\sin\theta} \left[X - \cos\theta \left(\frac{u+v}{2}\right)\right]\right\} du dv.$$

Таким образом, для восстановления матрицы плотности ставится вариационная задача. Решать ее в данной работе предлагается с помощью нейросети, на вход которой подается набор координат, где требуется восстановить матрицу плотности. На каждом шаге в процессе реконструкции состояния нейросеть использует набор измерений для оптимизации матрицы плотности, возвращает ее, вычисляет значение функционала L , и дальше меняет матрицу так, чтобы минимизировать значение L . В работе использована обычная feed-forward сеть с несколькими скрытыми слоями.

Чтобы восстановленное состояние удовлетворяло необходимым свойствам матриц плотности, нейросеть возвращает не саму матрицу плотности, а некоторую другую матрицу A , после чего матрица плотности вычисляется как $\rho = A^+ A$, что делает ее положительно полуопределенной. Данная процедура выполняется на каждой итерации, как и нормировка матрицы на единичный след.

Предложенный метод был проверен на данных, полученных в реальном эксперименте. Для реконструкции матрицы плотности некоторого состояния была выбрана координатная сетка 200 на 200 точек в диапазоне $[-6; 6]$ по обеим осям. Число измеренных квадратур, использовавшихся при реконструкции, составляет около 5 000. Ниже на рис. 1 графически представлены действительная и мнимая часть восстановленной матрицы плотности.

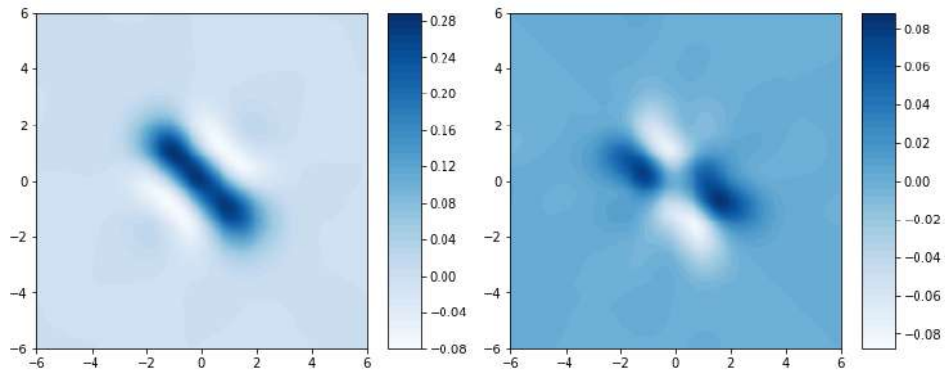


Рис. 1. Матрица плотности некоторого состояния, восстановленная по экспериментальным данным: слева действительная часть, справа – мнимая.

Для проверки точности предложенный метод был протестирован на искусственно сгенерированных данных, для которых достоверно известно исходное состояние. Для симуляции даже на достаточно грубой сетке 50 на 50 точек получается восстанавливать состояния с фиделити около 0,98. Таким образом, при правильном выборе архитектуры нейросети и при достаточно мелкой вычислительной сетке можно восстанавливать матрицы плотности квантово-оптических состояний с высокой точностью.

Литература

1. *I. Lvovsky* Iterative maximum-likelihood reconstruction in quantum homodyne tomography // Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics, Volume 6, Number 6
2. *E. S. Tiunov, V. V. Tiunova (Vyborova), A. E. Ulanov, A. I. Lvovsky, and A. K. Fedorov* Experimental quantum homodyne tomography via machine learning // Optica Vol. 7, Issue 5, pp. 448-454 (2020)
3. *Vladimir Man'ko, Marcos Moshinsky and Anju Sharma* Diffraction in time in terms of Wigner distributions and tomographic probabilities // Phys. Rev. A 59, 1809

УДК 530.145

Классификация запутанных состояний с помощью метода обучения с путаницей

М.А. Гавреев^{1,2}, А.С. Мاستюкова^{1,2}, Е.О. Киктенко^{1,2,3}, А.К. Федоров^{1,2}

¹Российский квантовый центр

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

Квантовые технологии используют такие эффекты как суперпозиция и запутанность. Однако, как известно, проблема определения того является ли квантовое состояние запутанным или сепарабельным требует в общем случае довольно больших вычислительных ресурсов и является NP-сложной задачей. В этой работе мы представляем подход к решению задачи классификации запутанности, который основан на методе машинного обучения известном как “обучение с путаницей” (learning by confusion) [1]. Для реализации данного метода строится преобразование квантовых состояний, которое позволяет осуществить переход через точки из пространства максимально запутанных состояний в пространство сепарабельных состояний. В качестве входных данных для предлагаемой схемы используются вероятностные представления квантовых состояний, которые задаются измерениями с использованием симметричной информационно полной положительной операторно-значной меры (SIC-POVM).

Рассмотрим два гильбертовых пространства $\mathcal{H}_A$ и $\mathcal{H}_B$ размерностей d_A и d_B соответственно. Состояние, описываемое матрицей плотности ρ_{AB} в пространстве $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ является сепарабельным, если оно может быть записано в следующей форме:

$$\rho_{AB} = \sum_i \lambda_i \rho_A^i \otimes \rho_B^i, \quad (1)$$

где ρ_A^i и ρ_B^i - матрицы плотности в соответствующих гильбертовых пространствах $\mathcal{H}_A$ и $\mathcal{H}_B$ и $\lambda_i \geq 0$, $\sum_i \lambda_i = 1$.

Следуя определению выше, мы можем заключить, что подпространство сепарабельных состояний имеет выпуклую структуру во всем пространстве состояний (Рис. 1.).

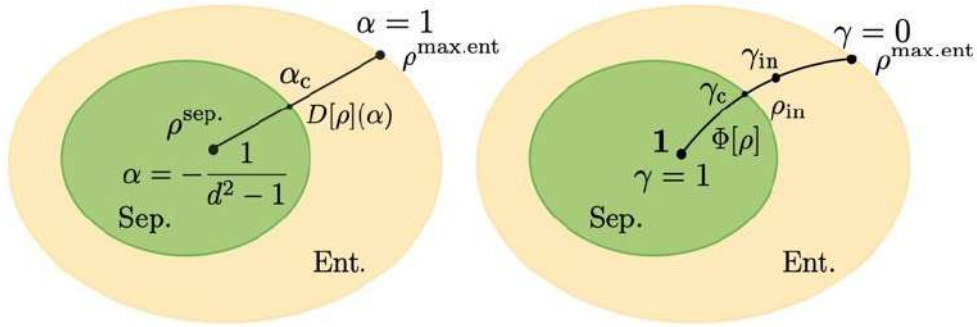


Рис. 1. Путь из пространства запутанных состояний к пространству общих состояний, который описывается деполяризующим каналом $D^\alpha[\rho]$ и путь через три точки, который можно описать квантовым преобразованием $\Phi[\rho]$.

Примером преобразования максимально запутанного состояния в максимально смешанное является деполяризующий канал. Для случая $d_A = d_B = d$ действие деполяризующего канала имеет следующий вид:

$$D^\alpha[\rho] := \alpha\rho + \frac{1-\alpha}{d^2}\text{Id} \cdot \text{Tr}[\rho], \quad (2)$$

где $-\frac{1}{d^2-1} \leq \alpha \leq 1$ - это параметр деполяризации, а Id - это единичная матрица необходимой размерности. В случае, когда входное состояние ρ является максимально запутанным, состояние $D^\alpha[\rho]$ является сепарабельным при $-\frac{1}{d^2-1} \leq \alpha \leq \frac{1}{d+1}$, запутанным при $\frac{1}{d+1} \leq \alpha \leq 1$. Критическое значение параметра $\alpha^* = \frac{1}{d+1}$ может быть найдено при помощи метода обучения с путаницей для входных данных вида (Рис. 2.):

$$\{\text{Tr}(UD^\alpha[\rho]U^\dagger\Pi_i \otimes \Pi_j)\}_{i,j}, \quad (3)$$

где U - случайные локальные унитарные операторы, Π_i, Π_j - элементы SIC-POVM.

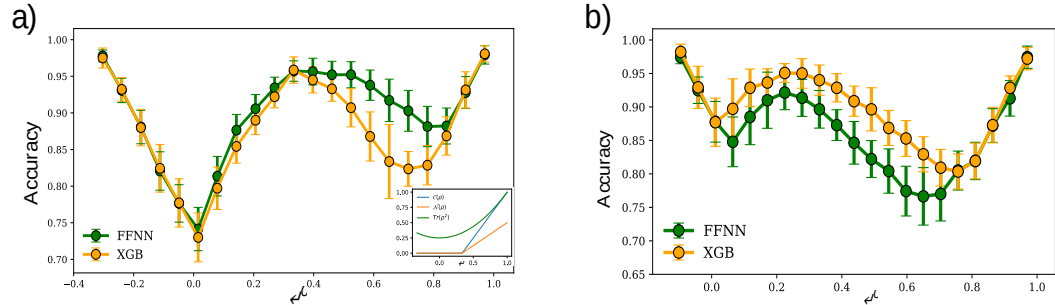


Рис. 2. Универсальные W-образные формы зависимости выходной точности обучения нейронной сети от параметра деполяризации в случае (a) кубитного и (b) кутритного состояний.

Для решения задачи классификации запутанности произвольного квантового состояния его матрица плотности должна быть включена в обучающий набор данных для нейронной сети. Для этого мы предлагаем следующее преобразование входного состояния.

Представим входное состояние в виде термального при $T = 1$:

$$\rho_{\text{in}} = \frac{1}{Z}e^{-H_{\text{in}}}, \quad (4)$$

где гамильтониан H_{in} может быть представлен в виде суммы локальной и нелокальной частей $H_{\text{in}} = H_{\text{in}}^{\text{loc}} + H_{\text{in}}^{\text{non-loc}}$, к которым применяется преобразование:

$$H(\gamma) = 2\gamma H_{\text{in}}^{\text{loc}} + 2(1-\gamma)\tilde{U}(\gamma)H_{\text{in}}^{\text{non-loc}}\tilde{U}^\dagger(\gamma), \quad (5)$$

где $\gamma \in [0, 1]$, $\tilde{U}$ - унитарный оператор, такой что $|\phi_{\text{max}}\rangle = \tilde{U}(0)|\phi_{\text{gs}}\rangle$, где $|\phi_{\text{gs}}\rangle$ - состояние с минимальной энергией гамильтониана $H_{\text{in}}^{\text{non-loc}}$, $|\psi_{\text{max}}\rangle$ - ближайшее к нему максимально запутанное состояние, $\tilde{U}(1/2) = \text{Id}$.

Тогда итоговое преобразование имеет следующий вид:

$$\Phi^\gamma[\rho_{\text{in}}] = \frac{1}{Z(\gamma)} e^{-H(\gamma)/T(\gamma)}, \quad (6)$$

где $T(\gamma) = \tan(\gamma\pi/2)$.

Заметим, что $\Phi^{\gamma=1/2}[\rho_{\text{in}}] = \rho_{\text{in}}$, таким образом преобразование $\Phi^\gamma[\rho_{\text{in}}]$ позволяет включить входное состояние в набор данных вида:

$$\{\text{Tr}(U\Phi^\gamma[\rho_{\text{in}}]U^\dagger\Pi_i \otimes \Pi_j)\}_{i,j}. \quad (7)$$

Сравнение положения максимума W-образной формы зависимости точности обучения нейронной сети от параметра γ со значением $\gamma = 1/2$ позволяет сделать вывод о запутанности или сепарабельности входного состояния ρ_{in} .

Результаты данной работы были получены при поддержке гранта РФФИ № 20-42-05002.

Литература

1. van Nieuwenburg, E., Liu, Y. & Huber, S. Learning phase transitions by confusion// Nature Phys 13, 435–439 (2017).

УДК 535.145

Неразрушающие квантовые измерения кубитов

В.А. Журавлев¹, С.Н. Филиппов^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физико-технологический институт РАН

³Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

Квантовые измерения описываются с помощью положительно определенных операторно-значных мер (positive operator-valued measure, POVM). Однако такой подход не позволяет найти состояние системы после измерения и не предполагает дальнейшую квантовую эволюцию [2]. Более общим подходом к квантовым измерениям являются квантовые инструменты и измерительные модели. Такие математические объекты позволяют не только описывать любые измерения квантовых систем, но и находить эволюцию квантовой системы после процесса измерения. Не все физические реализации измерений позволяют описывать состояние измеренной квантовой системы. Например, измерение координаты фотона с помощью экрана приводит к уничтожению фотона и его квантового состояния. Такие измерения мы называем разрушающими. Иногда принципиально невозможно измерить квантовую систему не разрушив её состояние, однако для некоторых алгоритмов и экспериментов такая возможность очень полезна.

В данной работе мы показываем, что наличие только разрушающих проективных измерений кубитов позволяет проводить произвольные неразрушающие измерения кубитов. Кроме того, результаты работы позволяют производить измерения произвольных наблюдаемых кубита. Известный до этого способ — расширение Наймарка [1] не позволяет проводить измерения неразрушающим образом.

Работа опирается на анализ свойств квантовых инструментов. Квантовым инструментом I назовем отображение, которое каждому элементарному исходу эксперимента ставит в соответствие квантовую операцию (вполне положительный не увеличивающий след эндоморфизм), причем отображение удовлетворяет свойствам: $\text{Tr}(I(\Omega)[\rho]) = 1$, $I(\Omega)[\rho] = 0$, $I\left(\sum_k x_k\right)[\rho] = \sum_k I(x_k)[\rho]$. Здесь x_k — различные элементарные исходы, ρ — произвольное состояние квантовой системы, 0 — нулевой оператор. Вероятность исхода x_k определяется $\text{Tr}(I(x_k)[\rho])$. Известно, что измерения в терминах наблюдаемых всегда можно свести к построению некоторого инструмента. Наблюдаемая (POVM) это отображение из пространства элементарных исходов в положительно ограниченные операторы. Отображение таково, что $A: A(\Omega) = E$, $A(\Omega) = 0$, $A\left(\sum_k x_k\right) = \sum_k A(x_k)$. Вероятность исхода x_k задается $\text{Tr}(A(x_k)\rho)$. Тогда для каждой наблюдаемой можно определить инструмент Людера (Lüders instrument) по следующему правилу: $I^A(x_k) = \sqrt{A(x_k)}\rho\sqrt{A(x_k)}$. Как нетрудно видеть, такой инструмент всегда определен, а вероятность исхода x_k одинакова для инструмента и наблюдаемой.

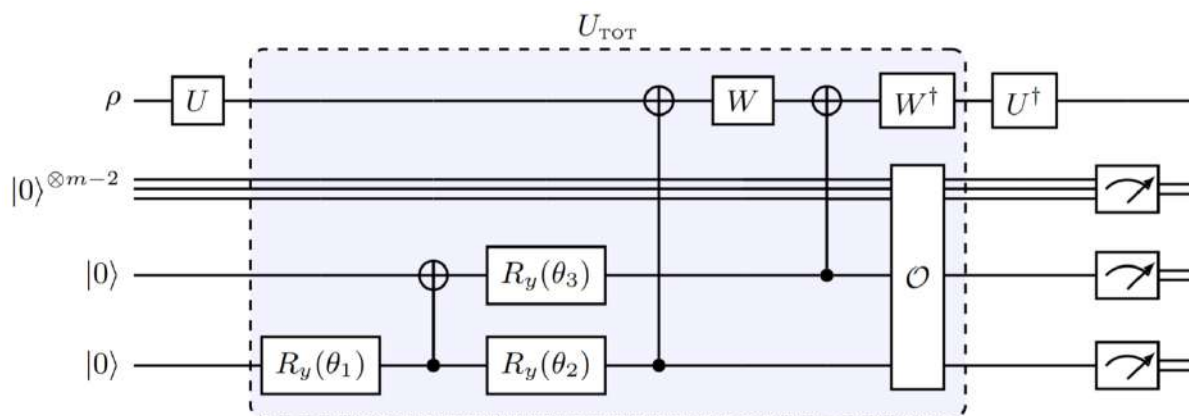


Рис. 1. Общая схема эксперимента, реализующая произвольную наблюдаемую одного кубита. Вентили $U, R_y(\theta_k), O$ зависят от исследуемой наблюдаемой.

В работе был найден способ построения инструментов Людерса для произвольной наблюдаемой одного кубита. Полученные результаты позволяют проводить неразрушающие измерения кубита произвольной сложности. Было показано, что предложенная схема (Рис. 1) использует оптимальное число вспомогательных кубитов. Результаты работы позволяют проводить произвольные измерения кубитов на современных квантовых компьютерах[3]. Например, были получены квантовые схемы для симметричной информационно-полной наблюдаемой, измерений во взаимно несмещенных базисах, измерения, соответствующие безошибочному различению двух квантовых состояний.

Литература

1. А.С. Холево. Квантовые системы, каналы, информация // М.: МЦНМО, 2010.
2. T. Heinosaari., M. Ziman. The mathematical language of quantum theory // Cambridge University Press.
3. V.A. Zhuravlev., S. N. Filippov. Quantum state tomography via sequential uses of the same informationally incomplete measuring apparatus // arXiv:2004.00966

УДК 004.032

Разработка схемы аппаратного ускорителя квантовых вычислений

С.М. Гушанский, В.С. Потапов

Южный федеральный университет

Институт компьютерных технологий и информационной безопасности

В последнее время наблюдается стремительный рост интереса к квантовым компьютерам. Их работа основана на использовании для вычислений таких квантово-механических явлений, как суперпозиция и запутывание для преобразования входных данных в выходные, которые реально смогут обеспечить эффективную производительность на 3 – 4 порядка выше, чем любые современные вычислительные устройства, что позволит решать перечисленные выше и другие задачи в натуральном и ускоренном масштабе времени. Актуальность данных исследований заключается в математическом и программном моделировании и реализации основополагающих компонентов моделей квантовых вычислений. Научная новизна данного направления выражается в оптимизации квантового вычислительного процесса.

Происходящий в мире прогресс в области квантовой обработки информации открыл новые перспективы использования квантово-механических явлений для обработки информации. Были разработаны примитивные аналоги квантового компьютера и безопасные квантовые криптографические системы, но пока не создано еще полноценного квантового вычислителя и первоначальной задачей является реализация модели квантового вычислителя и методики его построения с помощью существующих средств.

Данная методика предлагается под действием тех факторов, что сейчас моделирование квантовых вычислений все больше начинает использовать нестандартную аппаратуру для повышения

производительности моделей. Совмещая вычислительные возможности проблемно-ориентированной аппаратной части и алгоритмы оптимизации, которые позволяют минимизировать количество обрабатываемых состояний модели квантового регистра [1] предлагается методика, которая позволяет учитывать такие особенности модели квантового компьютера как:

- работа с комплексными числами;
- матричные и векторные операции (преобразование при помощи квантовых вентилей);
- параллелизм вычислений.

Общая схема аппаратного ускорителя изображена на рисунке 1. Блоки «Устройство управления» (УУ) и «Память микропрограммы» (ПМ) являются стандартными при реализации ускорителей.

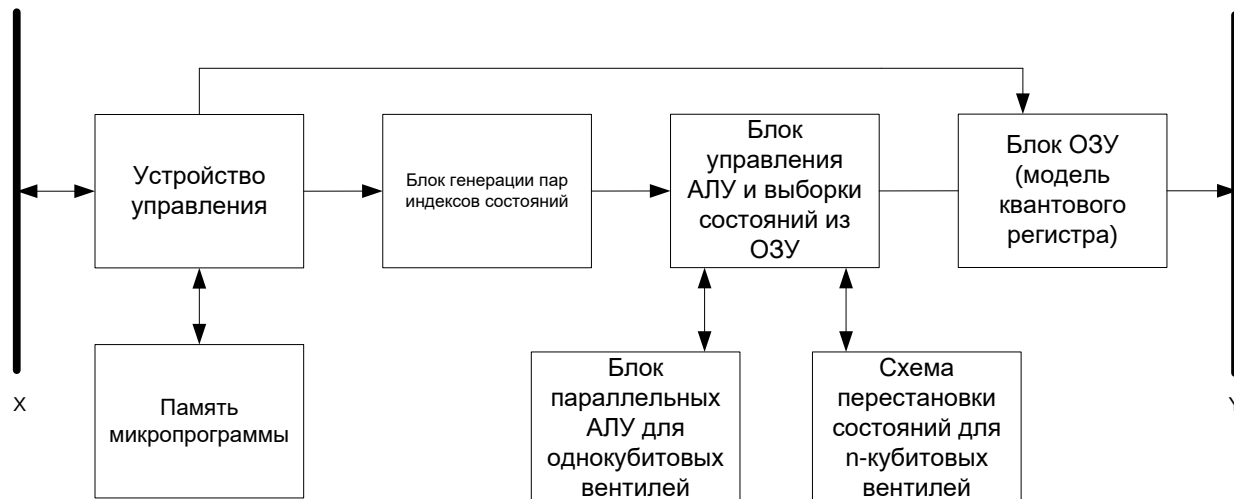


Рис. 1. Общая схема аппаратного ускорителя квантовых вычислений

Главными функциями УУ являются осуществление инициализации данных, организация выборки и исполнение команды из ПМ. Также УУ необходимо получать данные извне и правильно их обрабатывать. Однако поскольку существует большое количество интерфейсов, то схема контроллера интерфейса здесь не рассматривается и будем условно предполагать, что данные поступают с шины X, данные на которой формируются контроллером интерфейса ускорителя. Далее следуют блоки специфичные для ускорителя квантовых вычислений, а именно «Блок генерации пар индексов состояний» (БГИС) и «Блок управления АЛУ и выборки состояний из ОЗУ» (БУАиВС).

БГИС реализует алгоритм, который ищет последовательность состояний, в зависимости от операции (однокубитовая или многокубитовая) и кубита(ов) на который будет применяться данное воздействие. Сигналы выборки с БГИС поступают на вход БУАиВС, который определяет как наиболее эффективно извлечь данные из «блока ОЗУ» (БО), так как ОЗУ может быть несколько для увеличения производительности и организации параллелизма вычислений. «Блок параллельных АЛУ» (БПА) и «Схема перестановки состояний» (СПС) осуществляют непосредственно операции над данными извлеченными из ОЗУ. По окончании вычислений УУ посылает сигнал в блок ОЗУ для выдачи результата на шину Y. Как и в случае получения данных, шину Y можно рассматривать как контроллер интерфейса, по которому осуществляется связь с ПК. Методика построения такого рода ускорителя состоит из следующих пунктов.

- 1) Создание формата данных, который позволит уменьшить количество действий, затрачиваемых на арифметические операции.
- 2) Применение алгоритма оптимизации для уменьшения действий, связанных с конструированием матрицы преобразования квантового вентиля [2]. Данный алгоритм реализуется в БГИС (рис. 1).
- 3) Создание блоков БПА и СПС, которые являются основными вычисляющими схемами в структуре ускорителя.
- 4) Создание схемы управления АЛУ и выборки состояний из ОЗУ, которая позволит делать парную выборку состояний из блока ОЗУ. Можно использовать каскад из двух портовых ОЗУ, для осуществления одновременной выборки пар состояний.

5) Блоки УУ и ПМ являются общими для различных типов ускорителей. Создание данных блоков является типовым, а именно: при запуске вычислений УУ начинает считывать микрокоманду из ПМ и затем, дешифровав ее, передает управляющие сигналы на БГИС.

6) Осуществление инициализации модели квантового регистра. При инициализации модель квантового регистра, в нашем случае ОЗУ или каскад из ОЗУ, принимает вид как показано на рисунке 1. Поэтому в качестве начальных данных, которые необходимы для запуска вычислений, следует передать через интерфейс (шина X на рис. 1) номер состояния, который будет равен 1. Остальные состояния следует проинициализировать нулями.

7) Реализация считывания информации может происходить как на самом ускорителе, так и вне его. При считывании, согласно физике процесса квантовых вычислений, происходит коллапс волновой функции. Поэтому в зависимости от объема оставшегося места на кристалле (ПЛИС или жесткая логика) можно предложить схему осуществляющую последовательность действий, либо передать все данные в виде амплитуд состояний по интерфейсу на управляющий вычислитель.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №20-07-00916.

Литература

1. Potapov, V., Gushanskiy, S., Guzik, V., Polenov, M. The Computational Structure of the Quantum Computer Simulator and Its Performance Evaluation In: Software Engineering Perspectives and Application in Intelligent Systems. Advances in Intelligent Systems and Computing, vol. 763, P. 198-207. Springer (2019).
2. D. Boneh, M. Zhandry Quantum-secure message authentication codes // In Proceedings of Eurocrypt, P. 592 – 608, 2013.

УДК 530.145

Реализация квантовых алгоритмов на кудитах

А.С. Николаева^{1,2}, Е.О. Киктенко^{1,2,3}, А.К. Федоров^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Российский квантовый центр

³Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук

В настоящее время большинство разрабатываемых систем для реализации квантовых вычислений в качестве носителей квантовой информации используют кубиты — двухуровневые квантовые системы. Однако, в работах [1–3] было показано, что использование кудитов — d -уровневых квантовых систем — позволяет повысить точность выполнения квантовых алгоритмов.

Увеличение точности выполнения достигается за счёт уменьшения числа двухкубитных операций в разложениях многокубитных гейтов, которое, в свою очередь, становится возможным благодаря увеличенному пространству кудитов по сравнению с пространством кубита. Дополнительные уровни по отношению к первым двум (кубитным) уровням кудита могут быть рассмотрены в качестве состояний-анцилл, а также дополнительных логических кубитов. Так кутрит ($d = 3$) может быть рассмотрен в качестве логического кубита с уровнем-анциллой, а куквинт ($d = 5$) в качестве двух логических кубитов с общим уровнем-анциллой. Кукварт ($d = 4$) и куокт ($d = 8$) могут быть рассмотрены в качестве двух и трёх логических кубитов соответственно.

В данной работе рассмотрены реализации некоторых квантовых алгоритмов на кудитах с размерностью $3 \leq d \leq 8$ и такой топологией связей, в которой возможно реализовать двухкудитный гейт между двумя любыми кудитами, что экспериментально достижимо при реализации квантовых вычислений с использованием ионов. В качестве основного параметра для сравнения точности выполнения квантовых алгоритмов на кубитах и на кудитах была выбрана степень увеличения точности выполнения η , задающаяся следующим образом:

$$\eta = \frac{F_{\text{qudit}} - F_{\text{qubit}}}{F_{\text{qubit}}},$$

где F_{qudit} и F_{qubit} — точности выполнения алгоритмов при их реализации на кудитах и кубитах соответственно. В качестве исследуемых были выбраны следующие квантовые алгоритмы:

- алгоритм Дойча-Йожи;
- алгоритм Бернштейна-Вазирани;
- алгоритм обменного теста;
- алгоритм Гровера.

Результаты сравнения точности реализаций выбранных квантовых алгоритмов, каждый из которых задействовал при своей реализации три логических кубита, приведены в Табл. 1. Точности реализации однокубитных и двухкубитных операций при расчетах были выбраны равными 0.998 и 0.980 соответственно. В модели с полностью связной топологией связей кудитов наличие двух и более уровней-анцилл у логических кубитов не даёт выигрыша [1], поэтому точность выполнения алгоритмов на кудитах с размерностью $5 \leq d \leq 7$ совпадает.

Как видно из Табл. 1, при реализации алгоритма Дойча-Йожи на кудитах повышения точности выполнения зафиксировано не было, а при реализации алгоритма Бернштейна-Вазирани степень увеличения точности не превышала 1%. Отсутствие увеличения точности реализации обусловлено отсутствием многокубитных гейтов в этих алгоритмах, а небольшое повышение в 1% достигается благодаря размещению двух логических кубитов в пространстве одного кудита. В алгоритме обменного теста и алгоритме Гровера наблюдается увеличение степени точности выполнения с ростом числа задействованных в алгоритме логических кубитов. Это связано с тем, что ключевым элементом каждого из этих двух алгоритмов является обобщенный многокубитный гейт, в разложение которого входит меньшее число двухкубитных операций по сравнению с числом двухкубитных операций в его реализации на кубитах.

Размерность кудитов, d	3	4	5-7	8
алгоритм Дойча-Йожи	0%	0%	0%	0%
алгоритм Бернштейна-Вазирани	0%	1%	1%	1%
алгоритм обменного теста	11%	19%	19%	19%
алгоритм Гровера	11%	17%	17%	17%

Таб. 1. Степень увеличения точности выполнения квантовых алгоритмов с $N=3$ логическими кубитами (в том числе логическим кубитом-анциллой) при их реализации на кудитах с числом уровней $3 \leq d \leq 8$.

Таким образом, было установлено, что увеличение точности выполнения при использовании кудитов зависит от выбранного типа алгоритма. Наибольшее повышение точности наблюдается в алгоритмах, содержащих многокубитные обобщенные гейты, например, обобщенный гейт Тоффоли. В данной работе к алгоритмам такого типа относятся алгоритм Гровера и алгоритм обменного теста.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант №19-71-10091, разработка общего теоретического подхода), гранта УМНИК (Соглашение №103ГУ-ЦЭС8-D3/56361; анализ квантовых алгоритмов) и Программы Лидирующего исследовательского центра (ЛИЦ) по квантовым вычислениям (Соглашение №014/20; применение подхода для анализа экспериментальных платформ для квантовых вычислений).

Литература

1. Kiktenko E. O., Nikolaeva A. S., Xu, P., Shlyapnikov G. V., Fedorov, A. K., Scalable quantum computing with qudits on a graph // Phys. Rev. A. 2020. V. 101, N.2 P. 022304.
2. Lanyon B. P., Barbieri M., Almeida M. P., Jennewein T., Ralph T. C., Resch K.J., Pryde G. J., O'Brien J. L., Gilchrist A., White A. G., Simplifying quantum logic using higher-dimensional Hilbert spaces // Nature Physics 2009. V.5 P.134-140
3. Ionicioiu R., Spiller T. P., Munro W. J., Generalized Toffoli gates using qudit catalysis // Phys. Rev. A. 2009. V. 80, N.1 P. 012312

Трехкубитный запутывающий вентиль в системе трех двойных квантовых точек*А.М. Магомедрасулов¹, Л.Е. Федичкин²*¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)² Физико-технологический институт им. К.А. Валиева РАН

Исследована возможность выполнения трехкубитного запутывающего вентиля (в частности вентиля Тоффли) в квантовом регистре. В качестве кубита рассматривается подпространство основного состояния и первого возбужденного состояния электрона в двух квантовых ямах (двойная квантовая точка, далее ДКТ), сформированных электростатическим потенциалом в полупроводниковом гетеропереходе при достаточно низких температурах. В качестве состояний 0 и 1 выбраны состояния, отвечающие нахождению электрона в одной из ям ДКТ, данный выбор обусловлен возможностью проводить измерения с помощью точечного контакта [1]. Расположение ДКТ указано на рис. 1, в данном случае высота барьера между ямами центральной ДКТ зависит от положения электронов в боковых ДКТ, за счет чего предполагалось достичь не только запутывания, но и выполнения вентиля Тоффли над регистром. Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = H^0 + H^1 + H^2 + V_{\text{int}} \quad (1)$$

где H^0, H^1, H^2 - одноэлектронные гамильтонианы, соответствующие центральному и боковым ДКТ соответственно, $V_{\text{int}} = V_{01} + V_{02} + V_{12}$ - оператор кулоновского взаимодействия между электронами, V_{ij} - потенциал кулоновского взаимодействия между i -ым и j -ым электронами.

При выполнении численных расчетов использовался следующий потенциал для ДКТ:

$$U = \frac{m\Omega^2(x^2 + y^2)}{2} + V_B \exp(-(x/w)^2) \quad (2)$$

где m - эффективная масса электрона в GaAs, $\Omega = 3.9 \cdot 10^{14}$ ГГц, l - характерный размер ДКТ (25 нм), $w = 0.21$, $V_B = 3$ эВ. Спектр состояний электрона в ДКТ приближается спектром конечно-разностного одноэлектронного гамильтониана с потенциалом U [2]. Спектр рассчитывается для четырех случаев: 1) боковые ДКТ находятся в состоянии 1 2) одна из боковых ДКТ находится в состоянии 0, а вторая в состоянии 1 3) обе боковые ДКТ находятся в состоянии 0. Непосредственно из спектра мы получаем частоту осцилляций электрона в центральной ДКТ из состояния 0 в состояние 1. Таким образом получаем три значения частот осцилляций $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ соответствующие 1), 2) и 3) случаю соответственно. Чтобы за время T эволюции системы над кубитами был выполнен вентиль Тоффли, необходимо чтобы 1) боковые ДКТ за время T не успевали эволюционировать, 2) T удовлетворяло трем уравнениям (3).

$$\begin{cases} \alpha_1 T = 3\pi + 2\pi N, \\ \alpha_2 T = 2\pi + 2\pi N, \\ \alpha_3 T = 2\pi N \end{cases} \quad (3)$$

Избавляясь в (3) от T выразим N через первые два уравнения

$$N = \frac{3\alpha_2 - 2\alpha_1}{2(\alpha_1 - \alpha_2)} \quad (4)$$

Подбирая R (см. рис.1) добьемся чтобы N стало целым, тогда, подставляя его в третье уравнение из (3), получим выражение для T :

$$T = \frac{3\alpha_2 - 2\alpha_1}{2(\alpha_1 - \alpha_2)\alpha_3} \quad (5)$$

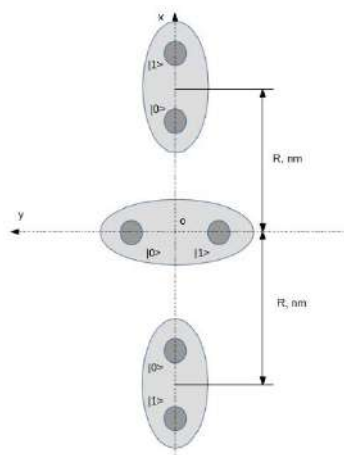


Рис. 1 Схематическое расположение двойных квантовых точек. Темные пятна - ямы в ДКТ, для каждой ямы на рисунке обозначено какому состоянию кубита она соответствует. R - расстояние между центрами ближайших друг к другу ДКТ.

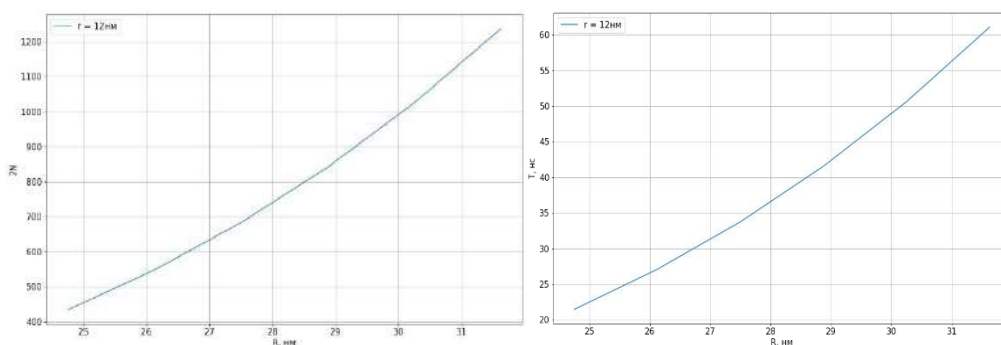


Рис. 2 Графики зависимости N от R (слева) и T от R (справа).

Литература

1. Gurvitz S.A. Measurements with a noninvasive detector and dephasing mechanism — Phys. Rev. B, 1997. V. 56. P. 15215-15223.
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 N. 4. P. 387-391.

УДК 530.145

Формализм операторов квантайзер-деквантайзер для построение новых интегральных преобразований между квазивероятностными функциями и томограммой

Л.А. Маркович

Институт проблем управления им. Трапезникова РАН
Институт проблем передачи информации им. Харкевича РАН
Российский квантовый центр

Интегральные преобразования (ИП) представляют собой мощный инструмент функционального анализа, который используется во многих областях математической физики для решения дифференциальных уравнений. Такое преобразование отображает уравнение из его исходной области, где решение уравнения может быть трудным, в другую область, где решение уравнения намного проще. ИП используются как в классической, так и в квантовой механике. В классической статистической механике состояние частицы характеризуется функцией распределения в фазовом пространстве. Знание функции распределения позволяет вычислять различные важные характеристики состояния частицы, например, средние значения энергии и момента количества движения. Однако в квантовой механике физическая наблюдаемая описывается эрмитовыми матрицами, связанными с эрмитовыми операторами, действующими в гильбертовом пространстве. Таким образом,

основные понятия состояний физических систем и физических наблюдаемых в квантовой механике и классической статистической механике кардинально отличаются. При определении совместной функции вероятностей в фазовом пространстве для квантовой системы возникает проблема упорядочения операторов. Различный порядок операторов положения и импульса не эквивалентны. Следовательно, квантовый оператор не может быть однозначно связан с классическими функциями. Вводится аналог функции распределения, называемый квазивероятным распределением $F(q,p)$. Однако, не существует единственного способа сопоставить квантово-механический оператор с заданной классической функцией в фазовом пространстве. Различные правила сопоставления функции некоммутирующих операторов с соответствующей функцией скалярных переменных дают, в общем, разные функции распределения. Тогда существует ряд квазивероятностных распределений и, соответственно, каждый оператор имеет несколько символов.

В 1932 году Вигнер ввел первую квазивероятность, и определил ее как интегральное преобразование Фурье матрицы плотности. Преобразование Фурье обратимо, поэтому информация о квантовом состоянии, содержащаяся в матрице плотности, совпадает с информацией, содержащейся в функции Вигнера. В литературе можно найти другие квазивероятности, такие как Кирквуд-Рихачек (KR), Обобщенная KR, Margenau-Hill, Page, Choi-Williams, Cohen, P- и Q-функция. Они связаны друг с другом интегральными преобразованиями с разными ядрами.

В [1,2] предложен томографический подход к квантовой механике, описание, которое может заменить волновую функцию и матрицу плотности. Квантовое состояние описывается с помощью вероятностного распределения, томограммы, основанного на интегральном преобразовании Радона функции Вигнера.

В связи с экспериментальной измеримостью томограммы квантовых состояний значительный интерес представляет поиск интегральных преобразований, связывающих томограмму с известными квази-распределениями.

В нашей работе мы рассмотрели на примерах различных квази-вероятностей аспекты процедуры квантования в рамках подхода, основанного на теории операторов квантаizer-деквантаizer [3,4], обеспечивающего обратимое отображение операторов, действующих в гильбертовом пространстве, на функции (символы операторов) с правилом ассоциативного произведения, соответствующим произведению операторов. Оператор A (это может быть как оператор плотности, определяющий квантовое состояние, так и операторы, соответствующие наблюдаемым) отображается на символ этого оператора $f(q,p)$. Символы операторов конструируются с помощью специального набора операторов, называемых деквантаизерами $U(q,p)$. Это множество может быть конечным или бесконечным, дискретным или непрерывным. Используя обратное интегральное преобразование, символ можно записать в терминах оператора A и специального набора операторов, называемых квантаизерами $D(q,p)$. Используя пару операторов квантаizer-деквантаizer, можно определить обратимое отображение оператора на функцию символа. Поскольку один оператор (матрица плотности) может быть идентифицирован многими символами (квазивероятными функциями и томограммой), интересно найти связь между их квантаизерами. Используя эту связь, нами введены ИП перечисленных ранее квазивероятностных функций в томограмму (и наоборот). Подобным образом можно вводить и новые квази-вероятности, используя известные в математике интегральные преобразования. В качестве примера нами выбрано преобразование Габора и введено квази-распределение Габора для описание квантовых систем.

Литература

1. Mancini, S., Man'ko, V.I., Tombesi, P. Wigner function and probability distribution for shifted and squeezed quadratures // Quantum and Semiclassical Optics: Journal of the European Optical Society Part B, 1995, 7, p.615—623.
2. Ibort, A., V.I. Man'ko, V.I., Marmo, G., Simoni, A., Ventriglia, F. An introduction to the tomographic picture of quantum mechanics // Physica Scripta, – 2009, 79, p.065013.
3. Ciaglia, F., Cosmo, F.D., Ibort, A., Marmo, G. Dynamical aspects in the quantizer-dequantizer formalism // Ann. Phys., – 385, p.769 – 781.
4. Man'ko, O., Man'ko, V.I., Marmo, G. Alternative commutation relations, star products and tomography // J. Phys. A, – 2002, 35, p.699–719.

Энтропия чистых состояний уровней энергии гармонического осциллятора в вероятностном представлении квантовой механики

А.П. Быков¹, В.И. Манько^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН

Рассмотрен одномерный гармонический квантовый осциллятор с гамильтонианом $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}$, имеющий волновые функции в координатном представлении и дискретный спектр энергий (для $m = 1$, $\omega = 1$, $\hbar = 1$):

$$\langle x|n\rangle = \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi 2^n n!}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) H_n(x), \quad E_n = n + \frac{1}{2}, \quad (1)$$

Фоковские состояния образуют ортонормированный базис $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$.

Симплектической квантовой томограммой состояний с действительными параметрами μ, ν называется функция распределения:

$$\omega(X, \mu, \nu) = \int W(x, p) \delta(X - \mu x - \nu p) dx dp \quad (2)$$

где $W(x, p)$ – функция Вигнера [1].

Симплектическая томограмма однозначно определена состоянием и выражается через оператор плотности $\omega_{\hat{\rho}}(X, \mu, \nu) = \text{tr}(\hat{\rho} \delta(X - \mu \hat{x} - \nu \hat{p}))$ и имеет физический смысл функции распределения вероятностей с нормировкой на единицу.

Томограмму состояний $|\psi\rangle$ для квантового осциллятора можно получить, исходя из связи томограммы и волновой функции, в виде выражения дробного преобразования Фурье:

$$\omega_{\psi}(x, \mu, \nu) = \frac{1}{2\pi|\nu|} \left| \int \exp\left(\frac{i\mu y^2}{2\nu} - \frac{ixy}{\nu}\right) \psi(y) dy \right|^2 \geq 0, \quad \omega_{\psi} = |\widehat{F}_{\mu\nu}[\psi](x)|^2 \quad (3)$$

Получена симплектическая квантовая томограмма для осциллятора:

$$\omega_n(x, \mu, \nu) = \frac{1}{2^n n!} \frac{1}{\sqrt{\pi(\mu^2 + \nu^2)}} \exp\left(-\frac{x^2}{\mu^2 + \nu^2}\right) H_n^2\left(\frac{x}{\sqrt{\mu^2 + \nu^2}}\right) \quad (4)$$

В базисе собственных векторов матрицы плотности может быть рассмотрена квантовая энтропия фон Неймана и определена как аналог информационной энтропии Шеннона: $S = -\sum_i \rho_i \ln(\rho_i)$. Энтропия фон Неймана чистых состояний равна нулю.

Энтропия Шеннона для состояний $|n\rangle$ квантового гармонического осциллятора может быть записана для координаты и импульса как:

$$S_n^{(x)} = - \int |\psi_n(x)|^2 \ln(|\psi_n(x)|^2) dx, \quad S_n^{(p)} = - \int |\psi_n(p)|^2 \ln(|\psi_n(p)|^2) dp \quad (5)$$

Для основного состояния осциллятора ($n = 0$) получено: $S_0 = S_0^{(x)} + S_0^{(p)} = \ln(\pi e)$

Так как томограмма имеет смысл распределения вероятности, то можно ввести энтропию, связанную с томограммой. Введение подхода к энтропии на основе томограммы состояния было рассмотрено в [2-11]. Итак, томографическая энтропия Шеннона с действительными параметрами μ, ν :

$$S(\mu, \nu) = - \int \omega(x, \mu, \nu) \ln(\omega(x, \mu, \nu)) dx \quad (6)$$

Для основного состояния осциллятора, согласно (4) имеем томограмму:

$$\omega_0(x, \mu, \nu) = \frac{1}{\sqrt{\pi(\mu^2 + \nu^2)}} \exp\left(-\frac{x^2}{\mu^2 + \nu^2}\right) \quad (7)$$

В ходе работы получена квантовая томографическая энтропия для основного и первого возбужденного состояний в зависимости от параметров. Получен сдвиг в первом возбужденном состоянии на константу Эйлера - Маскерони:

$$S_0(\mu, \nu) = \frac{1}{2} \ln(\pi e) + \frac{1}{2} \ln(\mu^2 + \nu^2) \quad (8)$$

$$S_1(\mu, \nu) = \frac{1}{2} \ln(\pi e) + \frac{1}{2} \ln(\mu^2 + \nu^2) + \frac{1}{2} \gamma_{EM} \quad (9)$$

Где γ_{EM} – постоянная Эйлера – Маскерони, определяемая как предел разности между частичной суммой гармонического ряда и натуральным логарифмом числа. $\gamma_{EM} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(-\ln(n) + \sum_{k=1}^n \frac{1}{k} \right)$.

Представленный подход может быть распространен на вопрос энтропии произвольных фоковских состояний и когерентных состояний параметрического квантового осциллятора.

Результатом работы является новое выражение энтропии чистых состояний квантового осциллятора и получение точного выражения для энтропии первого возбужденного состояния.

Литература

1. E. Wigner, Phys. Rev. 40, 749 (1932)
2. M. A. Man'ko and V. I. Man'ko, Found. Phys., 41, 330 (2011).
4. M. A. Man'ko and V. I. Man'ko, AIP Conf. Ser., 1488, 110 (2012).
5. M. A. Man'ko, Phys. Scr., 153T, 110 (2013).
6. M. A. Man'ko and V. I. Man'ko, J. Phys. Conf. Ser., 442, 012008 (2013).
7. M. A. Man'ko and V. I. Man'ko, Entropy, 17, 2876 (2015)
8. M. A. Man'ko, J. Phys. Conf. Ser., 1071, 012015 (2018).
9. J. A. Lopez-Saldivar, O. Castanos, E. Nahmad-Achar, et al., Entropy, 20, 630 (2018).
10. J. A. Lopez-Saldivar, O. Castanos, M. A. Man'ko, and V. I. Man'ko, Entropy, 21, 736 (2019).
11. J. A. Lopez-Saldivar, M. A. Man'ko, and V. I. Man'ko, Entropy, 22, 586 (2020).
12. J. A. Lopez-Saldivar, O. Castanos, M. A. Man'ko, and V. I. Man'ko, Quantum Inform. Process., 18, 210 (2019).

Секция космических исследований и современной астрофизики

Председатель: А.М. Садовский (к.ф.-м.н., профессор)

Зам. председателя: В.С. Бескин (д.ф.-м.н., профессор)

Секретарь: А.Ю. Малыхин

Дата: 25.11.2020 Время: 10:00

УДК 523.43-852

Активность гравитационных волн в атмосфере Марса на высотах 20 - 160 км по данным солнечного просвечивания аппарата ACS/TGO

Е.Д. Стариченко^{1,2}, Д.А. Беляев^{1,2}

¹Институт космических исследований Российской академии наук

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Гравитационные волны (ГВ) представляют собой периодические колебания воздушных масс, которые можно отследить по флуктуациям плотности, температуры, давления и других величин. Изучая высотные распределения плотности и температуры, мы характеризуем вертикальное распространение ГВ и оцениваем их влияние на связь между атмосферными слоями. Мы получаем и анализируем такие характеристики ГВ, как частоту Брента-Вайсяля, потенциальную энергию, амплитуды колебаний, потоки и ускорения.

В данной работе мы представляем первые результаты восстановления ГВ в атмосфере Марса по данным эксперимента по солнечному просвечиванию, выполняемому российским комплексом спектрометров ACS (Atmospheric Chemistry Suite) с борта орбитального аппарата TGO (TraceGasOrbiter) [1] миссии Экзо-Марс. ACS представляет собой комплекс инфракрасных спектрометров, изучающих атмосферу Марса с апреля 2018 года. Канал среднего ИК диапазона (ACS-MIR) представляет собой спектрометр со скрещенной дисперсией, работающий в области спектра 2.3-4.3 мкм с разрешающей способностью достигающей ~30 000. В режиме солнечного просвечивания спектрометр может наблюдать тонкие слои марсианской термосферы и нижней атмосферы в сильных (напр. 2.7 и 4.3 мкм) слабых (около 3 мкм) полосах поглощения CO₂ с вертикальным разрешением ~1 км. Спектрометр ближнего ИК диапазона (ACS-NIR) – эшелле-спектрометр работающий в спектральном диапазоне 0.73-1.6 мкм с разрешающей способностью ~25000 [2]. Благодаря высокому разрешению, эти инструменты (работающие одновременно) позволяют восстанавливать колебания температуры, давления и плотности в широком диапазоне высот от 20 до 160 км. Набор представленных данных включает в себя более 140 высотных профилей, полученных во второй половине 34 года в обоих марсианских полушариях. Анализ данных в ИКИ поддерживается грантом РФФИ #20-42-09035.

Литература

1. Korabiev O., Montmessin F., and ACS Team. "The Atmospheric Chemistry Suite (ACS) of three spectrometers for the ExoMars 2016 Trace Gas Orbiter", SpaceSci. Rev., 214:7, 2018.
2. Fedorova A. et al., 2020. Stormy water on Mars: The distribution and saturation of atmospheric water during the dusty season. Science, eaay9522. DOI: 10.1126/science.aay9522.

Анализ спектров пропускания водяного пара для атмосферы Марса в эксперименте по солнечному просвечиванию ACS-TIRVIM/ExoMars-TGO

Е.С. Федорова^{1,2}, Д.А. Беляев²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт космических исследований РАН

Изучение цикла водяного пара на Марсе имеет фундаментальное значение. По вертикальному распределению H_2O в зависимости от температурного режима в атмосфере и влияния пылевой бури можно судить о механизмах транспорта молекул H_2O в верхние слои атмосферы (мезосферу и термосферу), а также диссипации воды и водорода с планеты. Недавно было обнаружено увеличение концентрации H_2O на высотах до 70-100 км и насыщение водяного пара во время глобальной пылевой бури в 2018 году [1]. Это явление увеличивает вероятность потери воды Марсом.

В данной работе приведены результаты обработки спектров пропускания H_2O , полученных в эксперименте ACS-TIRVIM/ExoMars-TGO в режиме солнечного просвечивания атмосферы Марса (рис. 1). Канал теплового инфракрасного диапазона TIRVIM (2-17 мкм) российского спектрометрического комплекса ACS (Atmospheric Chemistry Suite) работает на орбите около Марса на борту аппарата ExoMars-TGO (Trace Gas Orbiter) с апреля 2018 года [2]. Измерения в режиме солнечного просвечивания со спектральным разрешением $\sim 0.1 \text{ см}^{-1}$ позволяют определять вертикальное распределение молекулы на высотах от 10 до 100 км в сильной полосе поглощения водяного пара около 2.65 мкм. В расчёте модельных спектров использовались данные из базы HITRAN 2016 [3] с учётом уширения линий H_2O в H_2O -атмосфере [4]. Также была произведена калибровка измеренных спектров с помощью спектра солнечного излучения. В работе представлены предварительные результаты: восстановленные профили концентрации H_2O , полученные с помощью сопоставления измеренных и модельных спектров в диапазоне 2.65-2.7 мкм.

Работа выполняется при поддержке гранта РНФ №20-42-09035.

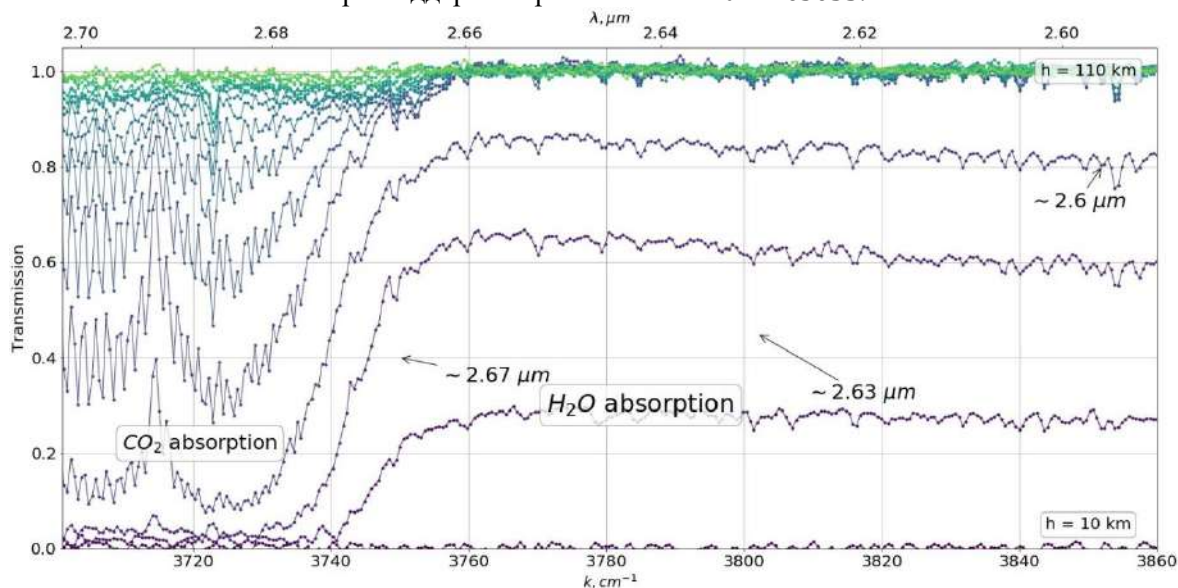


Рис. 1. Спектры пропускания, полученные ACS-TIRVIM (орбита 09FC01, высоты 10-110 км)

Литература

1. Fedorova A. et al. Stormy water on Mars: The distribution and saturation of atmospheric water during the dusty season. Science. 2020. eaay9522.
2. Korabiev O. I. et al. The Atmospheric Chemistry Suite (ACS) of three spectrometers for the ExoMars 2016 Trace Gas Orbiter. Space Sci. Rev. 2018, V. 214 P. 7.
3. Gordon I. E. et al. The HITRAN2016 molecular spectroscopic database. J. Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2017, V. 203, P. 3-69.
4. Gamache R. R. et al. A spectral line list for water isotopologues in the 1100-4100 cm^{-1} region for application to CO_2 -rich planetary atmospheres. J. Molecular Spectroscopy. 2016, V.326, P. 144-150.

Взаимодействие релятивистских электронов с сигналами наземных ОНЧ передатчиков

А.А. Лужковский^{1,2}, Д.Р. Шкляр^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт космических исследований РАН

Исследовано резонансное взаимодействие энергичных электронов с монохроматическими сигналами наземных ОНЧ передатчиков в предположении их дактированного распространения. В отличие от предыдущих исследований, где нелинейная динамика частиц рассматривалась в приближении заданного поля, в настоящей работе рассматривается самосогласованная задача, используя метод последовательных приближений. В нулевом приближении амплитуда сигнала задается чисто геометрическими факторами - изменением групповой скорости и сечения лучевой трубки вдоль траектории сигнала. В первом приближении, помимо этих факторов, учитывается линейный инкремент и определяется измененный профиль амплитуды, в котором рассчитывается нелинейный инкремент, с помощью которого находится новый профиль амплитуды. В предположении неустойчивой плазмы этот профиль оказывается асимметричным относительно экватора, так что амплитуда сигнала в полушарии, противоположном передатчику, существенно выше, чем в полушарии, где находится передатчик. Это приводит к тому, что захваченные по фазе резонансные частицы значительно ускоряются при взаимодействии с сигналом передатчика.

Мы полагаем, что ОНЧ передатчик располагается на L-оболочке 3 и излучает сигнал с частотой $f = 10$ кГц, который в магнитосфере Земли распространяется в виде свистовой волны. Мы исследуем взаимодействие электронов с такой волной, считая внешнее магнитное поле Земли B_0 дипольным. Показатель преломления и групповая скорость свистовой волны при продольном распространении и при условии $\omega_p^2 \gg \omega_c^2$ даются выражениями [1]:

$$N^2 = \frac{k^2 c^2}{\omega^2} = \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega_c - \omega)}, \quad v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = 2c \frac{\omega^{1/2} (\omega_c - \omega)^{3/2}}{\omega_p \omega_c},$$

где c – скорость света в вакууме, ω_p – плазменная частота, ω_c – циклотронная частота. Учитывая правую круговую поляризацию свистовой волны при дактированном распространении, запишем ее магнитное поле в виде:

$$B_x = -B(s) \sin\left(\int k(s') ds' - \omega t\right),$$

$$B_y = -B(s) \cos\left(\int k(s') ds' - \omega t\right).$$

Здесь S – длина вдоль лучевой траектории, B – амплитуда магнитного поля волны, k – волновой вектор, $\omega = 2\pi f$. Компоненты электрического поля волны связаны с компонентами магнитного законом индукции Фарадея, амплитуда электрической волны $E = B / N$.

В случае дактированного распространения волны ее резонансное взаимодействие с электронами имеет место только на первом циклотронном резонансе при условии, что продольная скорость частицы $v_{||}$ близка к резонансной скорости $v_R = (\omega - \omega_c)/k < 0$ [2]. Пусть μ и W – магнитный момент и кинетическая энергия электрона, соответственно, тогда для резонансных частиц существует интеграл движения $W - \mu\omega = \text{const}$.

Поведение амплитуды волны вдоль лучевой траектории определяется законом сохранения энергии, который в стационарном случае дает:

$$\frac{1}{\sigma} \frac{\partial(\sigma v_g U)}{\partial s} = 2\gamma U \equiv -\langle \vec{j}_R \vec{E} \rangle, \quad U = \frac{B^2}{8\pi} \frac{\omega_c}{\omega_c - \omega},$$

где σ – поперечное сечение лучевой трубки, U – плотность энергии волны, γ – инкремент волны,

определяемый током резонансных частиц $\vec{J}_R$. Для расчета инкремента волны мы предполагаем функцию распределения электронов с конусом потерь вида:

$$F_0 = \frac{n_{heq}}{\pi v_T^3 I_\nu} \left(\frac{\mu \omega_{ceq}}{W} \right)^\nu \exp \left(-\frac{W}{T_E} \right).$$

Здесь $v_T = \sqrt{2T_E/m}$, m - масса электрона, n_{heq} - постоянная величина плотности энергичных электронов на экваторе, ω_{ceq} - циклотронная частота на экваторе, $I_\nu = \Gamma(3/2)B(\nu+1, 1/2)$, $\nu > 0$ и T_E - параметры распределения.

С данной функцией распределения линейный инкремент волны равен:

$$\gamma_L = \frac{4\pi^2 e^2 \omega_c^2 (\omega_c - \omega) n_{heq}}{mc^2 k^3 v_T I_\nu \omega_{ceq}^2} \exp \left(-\frac{v_R^2}{v_T^2} \right) \int_0^\infty dx \exp \left(-\frac{\omega_{ceq}}{\omega_c} x \right) \left(\frac{x}{w} \right)^\nu \left[-\frac{\nu x}{w} - x + \frac{\nu \omega_{ceq}}{\omega} \right], \quad w = \frac{W}{T_E}.$$

На Рис.1 а) показано изменение амплитуды $h = B/B_0$ вдоль лучевой траектории в первом приближении, в котором инкремент волны полагается равным линейному значению. На Рис.1 б) изображена асимметрия области захвата относительно экватора в зависимости от магнитного момента. Динамика релятивистских электронов определяется уравнениями движения, соответствующими гамильтониану, выраженному через сопряженные переменные $(p_\parallel, s)$, (μ, φ) :

$$H(t; p_\parallel, s; \mu, \varphi) = mc^2 \left[1 + \frac{p_\parallel^2}{m^2 c^2} + \frac{2\mu \omega_c}{mc^2} - \frac{2eA}{m^2 c^3} \sqrt{2m\mu \omega_c} \sin \varphi + \frac{e^2}{m^2 c^4} A^2 \right]^{1/2},$$

где $A = B/k$ - амплитуда векторного потенциала, $\zeta = \int k ds' - \omega t + \varphi$, φ - giroфаза. На Рис.2 представлена динамика безразмерной координаты $S = s/R_e$, кинетической энергии W , магнитного момента μ , безразмерного продольного импульса $P_\parallel = p_\parallel/mc$ и производной фазы $d\zeta/dT$ в зависимости от безразмерного времени T для захваченной по фазе частицы.

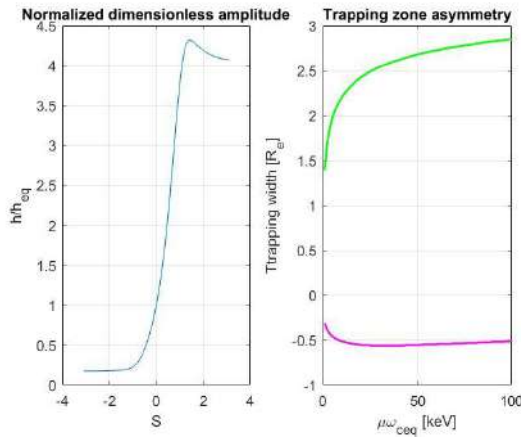


Рис.1 а) Амплитуда волны h ;
б) асимметрия области захвата

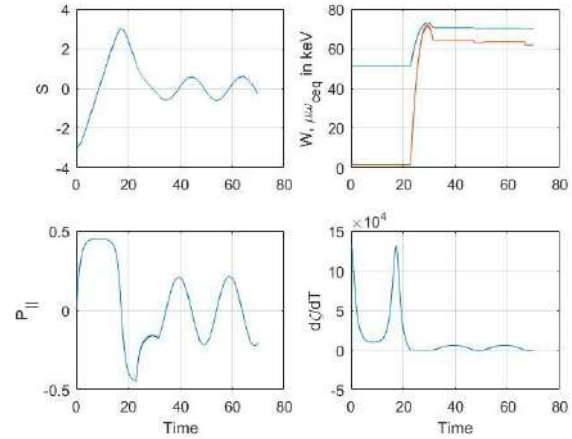


Рис.2 Параметры захваченной по фазе частицы в зависимости от безразмерного времени.

Таким образом, в случае неустойчивой плазмы, резонансное взаимодействие релятивистских электронов с диктированными сигналами ОНЧ передатчиков может приводить к заметному ускорению малой доли захваченных по фазе частиц.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-02-00179.

Литература

1. Helliwell R.A. Whistlers and related ionospheric phenomena. Stanford, Calif: Stanford University Press - 1965.

2. Karpman V.I., Istomin J.N., Shklyar D.R. Nonlinear theory of a quasi-monochromatic whistler mode wave packet in inhomogeneous plasma // Plasma Phys. 1974a. V. 16. P. 685

УДК 533.9.01

Волновые процессы во вращающейся плазме в приближении Буссинеска

М.А. Федотова², А.С. Петросян^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский институт)

²Институт космических исследований РАН

В работе исследуются линейные магнитогидродинамические волны в устойчиво стратифицированном вращающемся слое плазмы в приближении Буссинеска. Сила Кориолиса рассматривается в четырех различных приближениях: стандартной и нестандартной f-плоскостей, стандартной и нестандартной бета-плоскостей.

Полученные дисперсионные соотношения на f-плоскостях разрешимы аналитически в явном виде и описывают два типа волн: магнитные инерционно-гравитационные и магнитострофические волны. Их восстанавливающими силами являются сила Лоренца, сила плавучести и сила Кориолиса. Для найденных волн показано влияние учета горизонтальной составляющей силы Кориолиса на дисперсионные соотношения. При наличии горизонтальной составляющей магнитные инерционно-гравитационные и магнитострофические волны сохраняют свой вид в приближении горизонтальных возмущений. В отсутствие горизонтальной составляющей силы Кориолиса в приближении горизонтальных течений магнитные инерционно-гравитационные волны переходят в волны Альфвена, а магнитострофические волны в магнито-гравитационные волны.

Дисперсионные соотношения на бета-плоскостях неразрешимы аналитически в явном виде, но имеют важные частные решения. В низкочастотном пределе в обоих приближениях найдены трехмерные волны магнито-Россби. Показано, что в приближении горизонтальных потоков дисперсионные соотношения полученных волн магнито-Россби описывают двумерные волны магнито-Россби, аналогичные полученным в магнитогидродинамической теории мелкой воды. На стандартной бета-плоскости в приближении горизонтальных течений найдены решения в виде двух типов волн магнито-Россби и магнито-гравитационной волны. Кроме того, в предположении наличия возмущения только вдоль y-компоненты волнового вектора в приближении нестандартной бета-плоскости найдены решения дисперсионного уравнения в виде одномерных магнитных инерционно-гравитационных и магнитострофических волн.

В рамках исследования волновых процессов во вращающейся стратифицированной плазме в приближении Буссинеска была развита не только линейная теория, но и слабонелинейная теория: качественно исследованы дисперсионные кривые волн на наличие трехволновых взаимодействий, методом многомасштабных разложений получены амплитудные уравнения и найдены инкременты неустойчивостей типа распад и усиление. Данные результаты находятся вне рамок работы, представленной на конференцию МФТИ-63, с ними можно подробно ознакомиться в статье [1].

Работа поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «Базис» и грантом РФФИ № 19-02-00016.

Литература

1. Федотова М.А., Петросян А.С. Волновые процессы в трехмерных стратифицированных течениях вращающейся плазмы в приближении Буссинеска // ЖЭТФ 2020 Т.158 (2) с. 374.

УДК 52.08

Исследование гамма-вспышек Земного происхождения, зарегистрированных экспериментом GBM/Fermi

Е.С. Дзюба^{1,2}, А.С. Позаненко², П.Ю. Минаев²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт космических исследований РАН

Гамма-вспышки Земного происхождения (Terrestrial gamma-ray flashes – TGFs) – короткие (длительностью ~150 мкс) импульсы гамма-излучения с энергиями фотонов до 40 МэВ, регистрируемые со стороны атмосферы различными приборами на околоземной орбите. В данной работе исследованы гамма-вспышки Земного происхождения, зарегистрированные экспериментом GBM космической обсерватории Fermi с 2008 по 2016 год. Исследовано более 4000 событий TGF, для каждого события с помощью алгоритма байесовых блоков определены длительность и интегральный (по времени) поток. Построено распределение событий по длительности, с помощью которого определена характерная длительность события TGF в эксперименте GBM. Характерная длительность составила 150 мкс. С помощью алгоритма байесовых блоков также определено наличие у TGF многих пиков. Количество многопиковых событий составило порядка 6% от объема всей выборки. Для каждого события TGF с помощью минимизации квадратичных отклонений определен максимум события.

Исследованы группы событий, сформированные в зависимости от величины интегрального потока. Внутри каждой группы события просуммированы относительно найденного максимума индивидуального события. С помощью сравнения полученных суммарных кривых блеска групп событий непараметрическим образом произведен учет эффектов мертвого времени при регистрации TGFs в эксперименте GBM. Потери отсчетов из-за эффектов мертвого времени при регистрации наиболее мощных событий достигают 90%. Суммарные кривые блеска групп событий исследованы на симметричность: ни одна из суммарных кривых блеска не является симметричной, асимметрия профилей возрастает с уменьшением интегрального потока.

Литература

1. Bhat P. N., Fishman G. J., Briggs M. S., Connaughton V., Meegan C. A., Paciesas W. S., Wilson-Hodge C., Xiong S. Fermi Gamma-ray Burst Monitor Detector Performance at Very High Counting Rates // *Experimental Astronomy*. 2014. V. 38. P. 331–357.
2. Briggs M. S., Xiong S., Connaughton V., Tierney D., Fitzpatrick G., Foley S., Grove J.E., Chekhtman A., Gibby M., Fishman G. J., McBreen S., Chaplin V., Guiriec S., Layden E., Bhat N., Hughes M., Greiner J., von Kienlin A., Kippen R.M., Meegan C.A., Paciesas W.S., Preece R., Wilson-Hodge C., Holworth R. H., Hutchins M.L. Terrestrial Gamma-ray Flashes in the Fermi era: Improved Observations and Analysis Methods // *J. Geophysical Research Space Physics*. 2013. V. 118. Iss. 6. P. 3805–3830.
3. Dwyer J.R., Uman M.A. The physics of lightning // *Physics Reports*. 2014. V. 534. Iss. 4. P. 147–241.
4. Fishman G. J., Bhat P. N., Mallozzi R. et al. Discovery of intense gamma-ray flashes of atmospheric origin // *Science*. 1994. V. 264(5163) P. 1313–1316. DOI: 10.1126/science.264.5163.1313.
5. Grefenstette B.W., Smith D.M., Dwyer J.R., Fishman G. J. Time evolution of terrestrial gamma ray flashes // *Geophysical Research Letters*. 2008. V. 35. Iss. 6. P. 6644–6650.
6. Gurevich A.V., Milikh G.A., Roussel-Dupre R. Runaway Electron Mechanism of Air Breakdown and Preconditioning during a Thunderstorm // *Physics Letters A*. 1992. V. 165. P. 463–468.
7. Meegan C. A., Lichti G., Bhat P. N., Bissaldi E., Briggs M. S., Connaughton V., Diehl R., Fishman G., Greiner J., Hoover A. S., van der Horst A., von Kienlin A., Kippen R. M., Kouveliotou C., McBreen S., Paciesas W.S., Preece R.D., Steinle H., Wallace M.S., Wilson R.B., Wilson-Hodge C.A. The Fermi Gamma-ray Burst Monitor // *The Astrophysical J*. 2009. V. 702. Iss. 1. P. 791–804.
8. Østgaard N., Neubert T., Reglero V., Ullaland K., Yang S., Genov G., Marisaldi M., Mezentssev A., Kochkin P., Lehtinen N., Sarria D., Qureshi B.H., Solberg A., Maiorana C., Albrechtsen K., Budtz-Jørgensen C., Kuvvetli I., Christiansen F., Chanrion O., Heumesser M., Navarro-Gonzalez J., Connell P., Eyles C., Christian H., Al-nussirat S. First ten months of TGF observations by ASIM // *J. Geophysical Research: Atmospheres*. 2019. V. 124. Iss. 24. P. 14024–14036.
9. Stanbro M., Briggs M.S., Roberts O. J., Cramer E.S., Cummer S.A., Grove J.E. The First FermiGBM Terrestrial Gamma-ray Flash Catalog // *J. Geophysical Research Space Physics*. 2018. V. 123. Iss. 5. P. 4381–4401.
10. Tierney D., Briggs M. S., Fitzpatrick G., Chaplin V. L., Foley S., McBreen S., Connaughton V., Xiong S., Byrne D., Carr M., Bhat P. N., Fishman G. J., Greiner J., Kippen R. M., Meegan C. A., Paciesas W. S., Preece R., von Kienlin A., Wilson-Hodge C. Fluence Distribution of Terrestrial Gamma-ray Flashes Observed by the Fermi Gamma-Ray Burst Monitor // *J. Geophysical Research Space Physics*. 2013. V. 118. Iss. 10. P. 6644–6650.
11. Ursi A., Marisaldi M., Tavani M. Detection of terrestrial gamma-ray flashes with the AGILE/ MCAL // *Rendiconti Lincei. Scienze Fisiche e Naturali*. 2019. V. 30(S1). P. 265–269.

Исследование квазара с пиковой формой радиоспектра на масштабах парсек

Н.А. Косогоров^{1,2}, Ю.Ю. Ковалев^{2,1}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН

В данной работе мы представляем результаты по исследованию структуры квазара с пиковой формой радиоспектра 0858–279. Первоначальные наблюдения данного источника показали, что он обладает рядом пекулярных свойств. Одно из них — сильная переменность радиоизлучения в широкой полосе частот (рис. 1), которая была получена на РАТАН-600. При этом у квазара наблюдалась протяженная структура на масштабах парсек.

Для того, чтобы изучить особенности источника, были произведены наблюдения 26 ноября 2005 года на шести частотах, покрывающих диапазон с 1.4 по 22.2 ГГц, на VLBA системе. После этого были построены карты полной интенсивности и линейной поляризации, карты спектрального индекса и меры вращения. Высокое угловое разрешение, а также карты спектрального индекса (рис. 2) позволили увидеть и определить местоположение слабого ядра квазара, а также показали, что излучение яркой детали джета происходит в оптически тонком режиме на частотах выше 10 ГГц. Ниже этой частоты излучение является частично оптически толстым. Кроме этого, были произведены оценки индукции магнитного поля внутри этой яркой детали. Она оказалась равной $B = (0.55 \pm 0.22)\delta$ Гс в рамках модели однородного синхротронного источника (δ — релятивистский доплеровский фактор). Также индукция магнитного поля была оценена в плотной среде, окружающей джет. Высокие значения меры вращения (более 6500 рад/м²) и высокое значение магнитного поля в детали указали на природу возникновения яркого излучения в джете. Возможное объяснение состоит в том, что в месте видимого загиба джета происходит постоянная накачка энергии электронов за счет стоячей ударной волны. Кроме этого, с помощью карт меры вращения стало возможно восстановить структуру магнитного поля в джете. Направление магнитного оказалось перпендикулярным направлению распространения джета. Вся совокупность полученных результатов указывает на наличие стоячей ударной волны, в которой происходит ре-ускорение электронов.

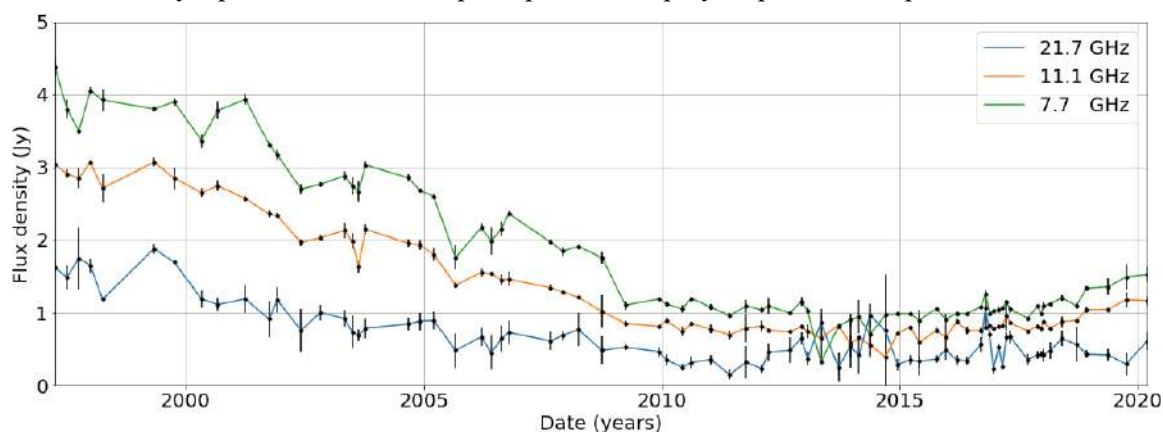


Рис. 1. Многочастотная кривая блеска квазара 0858–279, показанная для трех частот. Плотность потока варьируется более чем в два раза на временных масштабах порядка нескольких месяцев.

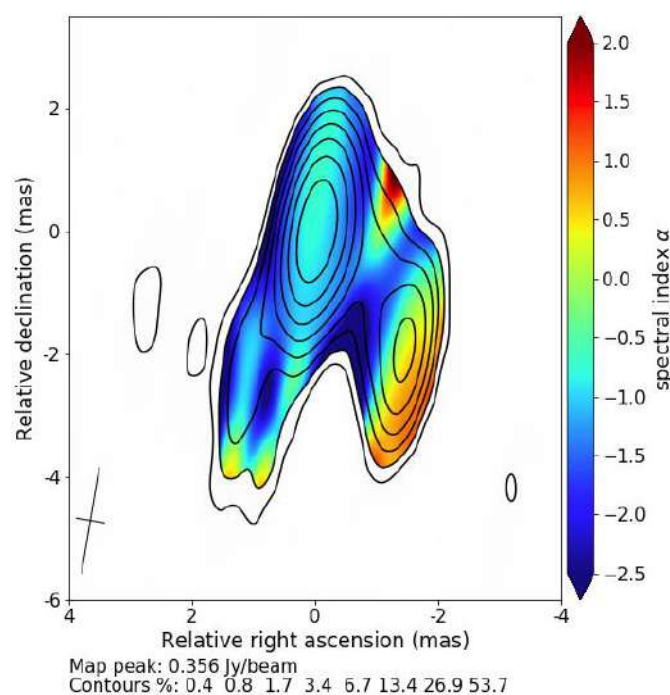


Рис. 2. Карта спектрального индекса для 22-15 ГГц. На карте показаны контуры полной интенсивности на 22.2 ГГц, а также значения спектрального индекса. В квазаре наблюдаются ярко выраженный регион с инвертированным спектром, в котором значения спектрального индекса становятся положительными и который можно отождествить с ядром. На 15.4 и 22.2 ГГц излучение доминирующей компоненты, находящейся в центре изображения, является оптически тонким. В левом нижнем углу крестом показаны параметры диаграммы направленности.

Литература

1. Kovalev Y.Y., Kovalev Yu.A., Nizhelsky N.A., Bogdantsov A.B. Broad-band Radio Spectra Variability of 550 AGN in 1997-2001 // *Astron. Soc. Aust.*, 2002, 19, 83–87
2. Slish V.I. *Angular Size of Radio Stars* // *Nature*, 1963, 199, 682
3. Marscher A.P. Accurate formula for the self-Compton X-ray flux density from a uniform, spherical, compact radio source. // *Astrophysical Journal*, January 1983, 264:296–297

УДК 524.3-52

Исследование физических характеристик и морфологии джета молодого звёздного объекта Th 28

Н.С. Дмитриенко¹, П.Э. Боли¹, С.Ю. Мельников^{2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Национальный университет Узбекистана

³Тюрингская государственная обсерватория

В работе представлены наблюдения молодого звёздного объекта Th 28 (V1190 Sco), полученные на спектрографе интегрального поля SINFONI телескопа VLT Европейской Южной Обсерватории. Авторами проведён анализ спектральной последовательности 2-мерных изображений объекта, которые покрывают спектр в ближнем инфракрасном диапазоне 1.1 - 2.45 мкм (широкие J, H, K полосы), с полем зрения 3"x3" и пространственным разрешением 0.1".

Особенностью изучаемого объекта является наличие перпендикулярного к лучу зрения асимметричного джета, проявляющегося в запрещенных линиях железа [FeII]. Излучение околозвездного газа видно во многих спектральных линиях, в том числе в линиях молекулярного и атомарного водорода. Имеющиеся данные позволяют изучить морфологию джета Th 28, а также дать оценку некоторым физическим характеристикам газовых структур вокруг центрального источника, таким как поглощение, температура возбуждения молекулярного водорода и столбцовые плотности.

Полученные результаты позволяют исследовать физические процессы, связанные с выбросом джета Th 28, с лучшим пространственным и спектральным разрешением, чем в предыдущих исследованиях, и тем самым дополнить уже имеющуюся информацию о процессах вблизи исследуемой области.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 18-72-10132.

Литература

1. Caratti o Garatti A., Giannini T., Nisini T., Lorenzetti D. H₂ active jets in the near IR as a probe of protostellar evolution // A&A 449, 1077-1088 (2006)
2. Krauter J. Th 28: a new bipolar Herbig-Haro jet // A&A 161, 195-200 (1986)

УДК 52-732 524.3-59

Исследование фона в гамма-диапазоне по данным SPI-ACS/INTEGRAL на основе большой выборки гамма-всплесков

Г.Ю. Мозгунов^{1,2}, А.С. Позаненко^{1,2}, П.Ю. Минаев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт космических исследований РАН

Исследование фона для детектора SPI-ACS космической обсерватории (КО) INTEGRAL ранее не проводилась. В то же время исследование фона, вариаций на различных масштабах важно для поиска транзиентов, длительных наблюдений стационарных источников и других задач. Понимание механизмов образования фонового сигнала может использоваться для его физического моделирования, то есть исследования различных физических механизмов вносящих в общий вклад регистрации фонового сигнала, что в ряде случаев является приоритетным над аналитическими моделями [напр., 1]. Подобная работа проводилась для других экспериментов, работающих в гамма-диапазоне, например, GBM/Fermi [1], BAT/Swift [2], SPI/INTEGRAL [3],

В работе используются данные детектора SPI-ACS, находящегося на борту космической обсерватории INTEGRAL [3]. КО INTEGRAL имеет высокоэллиптическую орбиту, что позволяет ей находиться большую часть времени выше радиационных поясов. Из-за этого, возрастает среднее значение фона, но стабильность фона становится значительно лучше, чем у околоземных космических аппаратов. Детектор SPI-ACS регистрирует гамма-излучение в диапазоне от ~80 до 10⁴ кэВ в поле зрения, близком к 4π.

С момента запуска КО INTEGRAL в 2002 году детектором SPI-ACS было зарегистрировано более 4т. космических гамма-всплесков. Из них было отобрано 787 самых мощных событий из общего каталога гамма-всплесков, поддерживаемого на основе большого количества различных орбитальных экспериментов как околоземных, так и межпланетных (IPN3). События случайно расположены во времени, что сформировало независимую выборку для исследования не только самих гамма-всплесков, но и окружающего их фона. Для каждого всплеска проводилось исследование окружающего его фона, то есть подбор наилучшей аналитической модели. Исследование состояло из определения интервала вокруг события гамма-всплеска, аппроксимации фона двумя моделями (полиномом первой или третьей степени), вычитания наилучшей модели из данных для кривой блеска самого гамма-всплеска. Кроме параметров всплеска определялись и параметры фона. Среди них: выборочное среднее, выборочная дисперсия, длина интервала аппроксимации, а также параметр Δ – максимальное относительное отклонение модели фона от среднего значения. Оказалось, что оптимальной моделью фона является полином 3-ей степени (51% случаев), линейная модель может быть принята в 43% случаев, и 6% всплесков были отброшены; фон не описывался выбранными моделями.

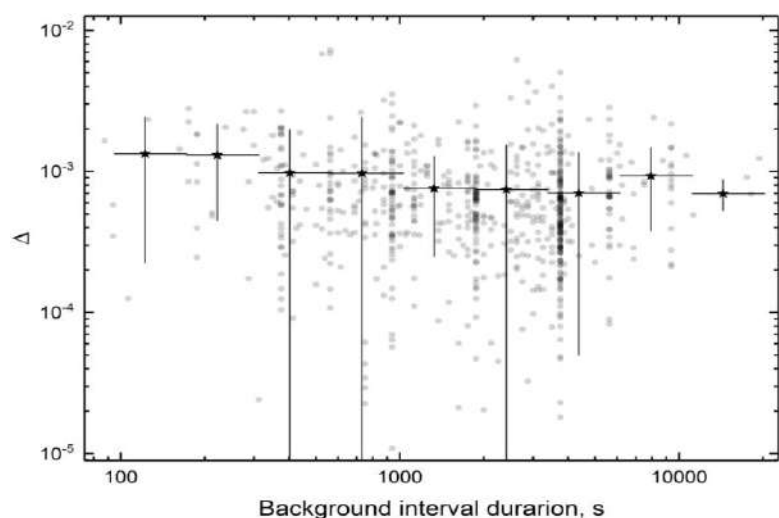


Рис.1 Зависимость параметра Δ от длины фонового интервала. Полупрозрачными кружками обозначены индивидуальные события. Сплошными линиями показаны значения и СКО, сгруппированные по длительности интервала

В частности, исследована зависимость параметра Δ от эпохи наблюдения и от длины фонового интервала (Рис. 1). Анализ среднего и дисперсии показал отклонение от пуассоновского распределения. Выборочная дисперсия в k раз больше выборочного среднего, где k меняется в зависимости от эпохи в интервале $[1.2 - 1.8]$. Была обнаружена значимая корреляция ($P < 10^{-10}$) между k и Солнечной активностью (Рис. 2, верхняя панель). Величина запаздывания изменения параметров фона относительно Солнечной активности составила ~ 0.8 лет. Подтверждена антикорреляция выборочного среднего и Солнечной активности, обнаруженная у телескопа SPI/INTEGRAL [3]. Такое поведение параметров объясняется значительным вкладом галактических космических лучей в уровень фона, также регистрируемых, как фон в этих экспериментах, то есть их экранированием магнитным полем Солнечного ветра [напр., 4].

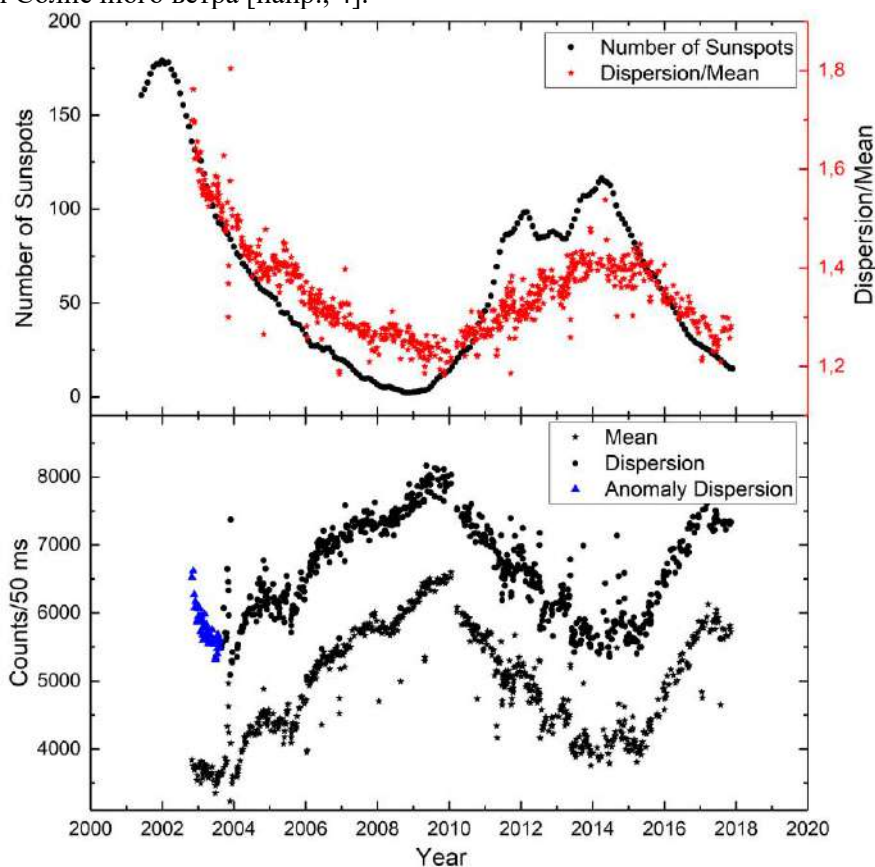


Рис.2. Зависимость параметров фона от эпохи наблюдения. Сверху: количество Солнечных пятен (чёрные кружки) и параметр k (красные звёзды). Снизу: среднее и выборочная дисперсия (чёрный), синими треугольниками указаны аномальные значения дисперсии.

Продлённое излучение гамма-всплесков - излучение, наблюдающееся после активной фазы гамма-всплеска. Его длительность может достигать десятков тысяч секунд. Для решения этой и других подобных задач необходимо качественное моделирование фона. Исследование фона, проведенное в работе, в частности, позволило найти продленное излучение у 20% событий, взятых случайным образом для исследования.

Литература

1. *Biltzinger B.* [et al.], A physical background model for the Fermi Gamma-ray Burst Monitor // *Astron. Astrophys.*, 640, A8 (2020)
2. *Ajello M.* [et al.], Cosmic X-Ray background and Earth albedo spectra with Swift // *The Astrophysical Journal*, 689, 666–677 (2008)
3. *Diehl R.* [et al.], INTEGRAL/SPI γ -ray line spectroscopy Response and background characteristics // *Astron. Astrophys.*, 611, A12 (2018)
4. *Potgieter M. S.*, Solar Modulation of Cosmic Rays // *Living Reviews in Solar Physics*, 10, 3 (2013)

УДК 524.3-36

К вопросу о нуклеосинтезе нейтронных звёзд

А.Ю. Игнатовский

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

Рассмотрена оболочка нейтронной звезды в различных диапазонах высоких плотностей и температур. В таких условиях открыты все каналы ядерных реакций, скорости этих реакций много больше бета-реакций – в таких условиях применимо приближения ядерного статистического равновесия, которое даёт распределение всех ядер системы через соотношение Саха.

Реализована программа на языке Fortran, моделирующая изменение химического состава оболочки нейтронной звезды при постоянных давлении и температуре. Произведено сравнение с работами нескольких авторов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-02-00455 А.

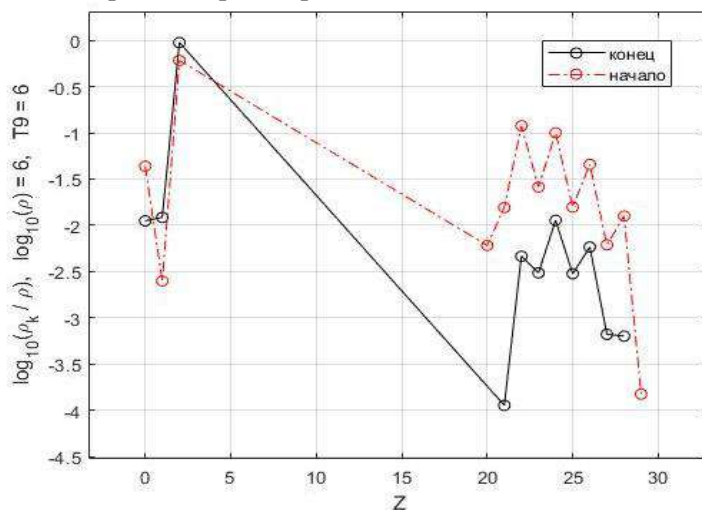


Рис.1. Эволюция массовых долей химических элементов с малым значением зарядового числа Z . Красная штрихпунктирная линия – начальный состав, черная сплошная – итоговый.

Литература

1. *Burbidge E.M., Burbidge G.R., Fowler W.A., Hoyle F.*, Synthesis of the Elements in Stars, Reviews of modern physics // V. 29, p. 547, 1957.
2. *Cameron A.G.W.*, Elemental and nuclidic abundances in the solar system, Space science reviews // V. 15, 1973.
3. *Бисноватый-Коган Г.С., Чечёткин В.М.*, Нуклеосинтез при взрыве сверхновых и химический состав оболочек нейтронных звёзд // *Astrophysics and space science*, V. 26, p. 3, 1974.
4. *Hillebrandt W.*, The rapid neutron-capture process and the synthesis of heavy and neutron-rich elements // *Space Science Reviews*, Vol. 21, Issue 6, p. 639, 1978.

5. Clifford F.E., Tayler R.J., The equilibrium distribution of nuclides in matter at high temperatures // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, V. 129, p. 104, 1965.

УДК 533.9.082

Комплекс приборов для анализа космической плазмы

К.И. Ким

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

В данной работе рассматривается комплекс приборов, предназначенный для анализа функции распределения ионной и электронной компоненты солнечного ветра, магнитосферной и ионосферной плазмы, плазменной оболочки комет и астероидов. Электронно-оптические схемы были оптимизированы исходя из ограничений по потреблению и массе. Заявленный комплекс состоит из энерго-масс-анализатора ионов ULTIMAN-I [1], энерго-анализатора электронов ULTIMAN-E [1] и цилиндра Фарадея. Поле зрения ионного и электронного прибора покрывает полусферу и может быть расширено. Также электронно-оптическая схема ULTIMAN-I и ULTIMAN-E относительно быстро модифицируется.

Название прибора	Энергетическое разрешение $\Delta E/E$, %, %	Угловое разрешение, град	Диапазон регистрируемых масс, а.е.м.	Диапазон измеряемых энергий, эВ
Цилиндр Фарадея	15	5	1, 4	5-5000
ULTIMAN-I	11	20	1 - 70	5-30000
ULTIMAN-E	11	20	-	5-10000

Таб.1. Теоретические параметры приборов.

Характеристики комплекса перечислены в таблице 1. Моделирование параметров происходило в специальной программе SIMION. Совместное использование данных приборов в комплексе позволяет получить информацию о массовом составе плазмы, об энергетическом распределении электронов и ионов и угловые характеристики потока плазмы.

Литература

1. Oleg Vaisberg, Sergey Shuvalov, New ion energy-mass spectrometer ULTIMAN (ULTIMATE Mass ANalyzer) for space plasmas // arXiv:1907.07993.

УДК 53.082.77

Математическое моделирование формирования треков частиц солнечного ветра в многопроволочных 3D газовых детекторах для наноспутников

О.В. Филонин, К.С. Насонов

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева

С каждым годом требования к точности проводимых космических экспериментов становятся всё более высокими. Эксперименты, требующие высокого уровня точности измерений становятся возможными в следствии развития электроники. Высокоточные электронные измерительные системы особенно чувствительны к негативному воздействию факторов космического пространства, в частности, ионизирующему излучению различного происхождения [1]. Это влияние в виде зашумления результатов измерения видно на рис.1.

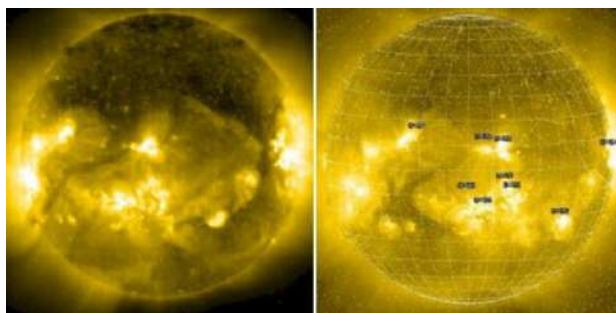


Рис. 1. Фотографии Солнца, сделанные прибором EIT (SOHO)

Левая фотография сделана до солнечной вспышки, тогда как правая – после. Как можно видеть, снимок сделанный после вспышки значительно зашумлен, число частиц испускаемых Солнцем увеличилось более чем в 4 раза.

Однако, помимо зашумленных результатов измерений, вероятны значительно более пагубные последствия, связанные с возникновением радиационных дефектов, способных как снижать эффективность работы этих устройств, так и вовсе выводить их из строя мгновенно или с течением времени. Исследование ионизирующего излучения позволяет совершенствовать подходы к разработке и проектированию космической техники с целью повышения надежности последней [2].

Авторами рассмотрены и исследованы некоторые процессы, инициируемые в рабочем объеме 3D трекового детектора предложенных конструкций. На рисунке (рис. 2) представлен эскиз многопроволочного 3D трекового детектора для наноспутника [3].

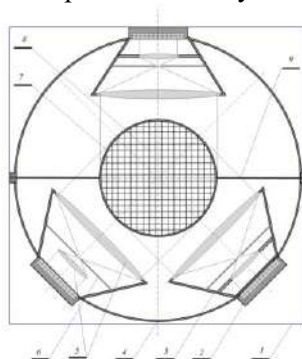


Рис. 2. Эскиз многопроволочного детектора для наноспутника

Главным образом, принцип работы детектора сводится к следующему – под действием ионизирующего излучения, рабочее тело, в роли которого выступает инертный газ, претерпевает ионизацию. С ростом числа электрон-ионных пар, вдоль траектории движения частиц, газ из ионизированного состояния переходит в состояние плазмы, под действием генерируемого электрического поля устанавливается несамостоятельный газовый разряд, который в силу явления рекомбинации в газе испускает кванты света – фотоны, в следствии чего трек частицы светится. Это свечение регистрируется ПЗС матрицами, далее из полученных изображений формируется массив исходных данных для решения задачи томографии с целью восстановления параметров детектируемых частиц [4].

В ходе работы были рассмотрены 2 варианта конфигурации электрического поля (в зависимости от конфигурации электродов), рис. 3:

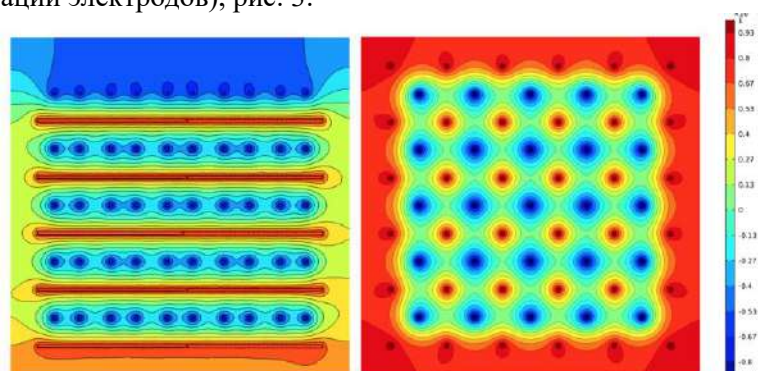


Рис. 3. Эквипотенциальные поверхности двух вариантов конфигурации анода и катода.

В ходе исследования были проанализированы процессы ионизации рабочего объема детектора, протонами и электронами различных энергий, оценены ионизационные потери энергии детектируемых частиц. Рассмотрены вопросы конфигурации электрического поля рабочего объема детектора. Выполнена оценка детектора относительно возможности детерминировать частицы различного сорта.

Результаты исследования позволяют сделать вывод о целесообразности проведения дальнейшего исследования детекторов подобной конструкции в качестве полезной нагрузки для космических аппаратов, так как их детектирующая и анализирующая способность позволяет весьма точно восстанавливать параметры ионизирующего излучения.

Работа выполнена в рамках проекта 0777-2020-0018, финансируемого из средств государственного задания победителям конкурса научных лабораторий образовательных организаций высшего образования, подведомственных Минобрнауки России.

Литература

1. *Панасюк, М.И.* Модель космоса. // М.И. Панасюк. – М.: КДУ, 2007. – 872 с.
2. *L. Malerba.* Primary Radiation Damage in Materials: periodical. // Nuclear Science. 2015. - №9– P. 86.
3. *О.В. Филонин., К.С. Насонов.* Миниатюрный многопроволочный детектор для наноспутников // Известия вузов. Приборостроение. 2019. –С. 492-498
4. *Филонин О.В.* Обратные некорректные задачи в космических исследованиях // О. В. Филонин. – Самара: СНЦ РАН, 2014. – 478 с.

УДК 524.1

Моделирование сцинтилляционных установок Tunka-Grande и TAIGA-Muon через инструментарий Geant4

М.Ю. Терновой

Иркутский государственный университет

Сцинтилляционные установки Tunka-Grande [1] и TAIGA-Muon [2] входят в состав единого экспериментального комплекса TAIGA, расположенного в Тункинской долине (республика Бурятия, Россия), в 50 км от озера Байкал [3]. Данный комплекс нацелен на изучение энергетического спектра и массового состава заряженных космических лучей в диапазоне энергий 100 ТэВ - 1000 ПэВ, поиск диффузного гамма-излучения свыше 100 ТэВ и исследование локальных источников гамма-квантов с энергиями более 30 ТэВ. Кроме сцинтилляционных установок в его состав входят широкоугольные черенковские установки Тунка-133 [4] и TAIGA-HiSCORE [5] и сеть атмосферных черенковских телескопов TAIGA-IACT [6].

Цель моделирования установок Tunka-Grande и TAIGA-Muon – решение задачи по поиску астрофизических гамма-квантов с энергией свыше 100 ТэВ. В качестве инструмента для имитации отклика сцинтилляционных детекторов был выбран программный пакет Geant4 [7]. При этом основное внимание было уделено максимально точному описанию установок, приближенному к реальности. Благодаря Geant4 была описана полная пространственная геометрия установок и промоделировано их взаимодействие с различными типами элементарных частиц. Также для всех компонент детекторов был задан конкретный химический состав и подробно описаны материалы, из которых они изготовлены. Особый акцент был сделан на сохранении быстродействия программного обеспечения.

Работа поддержана Минобрнауки России (гос. задание FZZE-2020-0024, соглашение № 075-15-2019-1631), РФФИ (проект 19-72-20067), РФФИ (проекты № 19-32-60003, 19-52-44002). Автор благодарит центр коллективного пользования «Иркутский суперкомпьютерный центр СО РАН» за предоставление доступа к вычислительному кластеру «Академик В.М. Матросов» [8], позволившему провести необходимые при моделировании работы вычисления.

Литература

1. *Monkhoev R. D.* [et al.]. The Tunka-Grande experiment: Status and prospects // *Bull. Russ. Acad. Sci.* 2017. V. 81. P. 468-470.
2. *Astapov I.* [et al.]. Scintillation detectors for the TAIGA experiment // *Nucl. Instrum. Meth. A.* 2019. V. 936. P. 254-256.

3. Budnev N. [et al.]. TAIGA—an advanced hybrid detector complex for astroparticle physics and high energy gamma-ray astronomy in the Tunka valley // *JINST* 15. 2020. C09031.
4. Berezhnev S.F. [et al.]. The Tunka-133 EAS Cherenkov light array: status of 2011 // *Nucl. Instrum. Meth. A*. 2012. V. 692. P. 98-105.
5. Gress O. [et al.]. The wide-aperture gamma-ray telescope TAIGA-HiSCORE in the Tunka Valley: Design, composition and commissioning // *Nucl. Instrum. Meth. A*. 2017. V. 845. P. 367-372.
6. Lubsandorzhiev N. [et al.]. The hybrid installation TAIGA: design, status and preliminary results // *PoS ICRC2019*. 2020. 729.
7. Agostinelli S. [et al.]. Geant4 – a simulation toolkit // *Nucl. Instrum. Meth. A*. 2003. V. 506(3). P. 250-303.
8. Иркутский суперкомпьютерный центр СО РАН [Электронный ресурс]. URL: <http://hpc.icc.ru>

УДК 533.922

Неразрешенные двойные звезды в рассеянных звездных скоплениях

О.И. Бородин^{1,2}, Д.А. Ковалева¹

¹ Институт астрономии РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Двойные звезды являются существенной составляющей звездного населения Галактики, поэтому важно понимать закономерности образования и динамической эволюции двойных звезд для исследования процессов динамической, физической и химической эволюции Галактики, а также учитывать их наличие в ряде астрономических задач, в том числе и при изучении рассеянных звездных скоплений (РЗС).

Данные, полученные космической миссией Gaia, позволяют вывести изучение РЗС на новый уровень благодаря высокоточным измерениям параллакс и собственных движений. Поэтому мы разработали наши методы для использования их на базе именно этого каталога.

Наши методы определения доли двойных звезд будут основываться на диаграмме звездная величина-показатель цвета, а значит модель скопления будет представлять собой список звездных величин звезд в фильтрах Gaia: G, BP и RP. Разработаны две независимые методики определения доли неразрешенных двойных звезд в рассеянных звездных скоплениях и исследованы их теоретические ограничения.

Первый метод основан на том, что положение двойной звезды на диаграмме звездная величина-показатель цвета однозначно задается массой главного компонента двойной M_1 и параметром $q = M_2/M_1$, где M_2 – масса вторичного компонента (рис. 1). Поэтому возможно решение обратной задачи, когда по положению звезды определяются эти параметры.

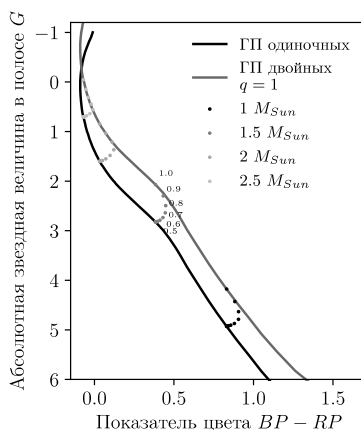


Рис.1. Положение двойной звезды на диаграмме звездная величина-показатель цвета при разной массе главного компонента и параметре q

Второй метод основан на том, что в отсутствие двойных звезд диаграмма звездная величина-показатель цвета будет представлять собой узкую полосу звезд на главной последовательности (ГП), ширина которой определяется ошибками фотометрии и физическую дисперсию расстояния до звезд внутри скопления. Двойные же звезды располагаются выше (в сторону более ярких звезд)

и вносят асимметрию в распределение плотности звезд по звездной величине. Метод профилей заключается в построении такого профиля и выделения профиля одиночных звезд (аппроксимацией гауссовой функцией) от двойных (рис. 2).

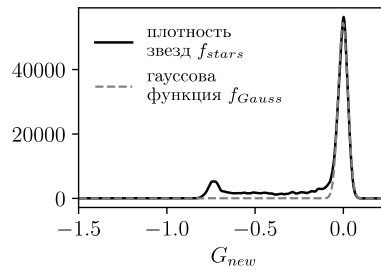


Рис.2. Профиль плотности для случая степенного распределения параметра q с показателем степени -2

При апробации методов на модельных скоплениях с заданной долей двойных выявлены следующие теоретические ограничения:

- 1) Метод координатных сеток можно применять в узком диапазоне исправленного за поглощение показателя цвета — от 0.13 до 0.33;
- 2) Метод координатных сеток верно отождествляет двойные с $q > 0.3$;
- 3) Метод профилей не имеет ограничений по показателю цвета кроме положения точки поворота изохроны;
- 4) Метод профилей верно определяет двойные с $q > 0.37$.

Затем с помощью разработанных методик были сделаны оценки доли двойных звезд по данным скопления NGC2516 и NGC2447. Доля двойных на одном и том же участке ГП скопления NGC2516 оценена как 96% методом координатных сеток и как 4% методом профилей. При этом на большом диапазоне по показателю цвета метод профилей позволил оценить долю двойных как равную 15%. Для скопления NGC2447 результаты снова разошлись: оценка доли двойных звезд, полученная методом координатных сеток, равна 92%, а методом профилей — 17%. На всем участке ГП доля двойных составила 21%. Отличие обусловлено тем, что метод координатных сеток не может являться достоверным в случае смещения теоретической изохроны от истинной, а метод профилей не справляется с участками ГП, на которых попадает мало звезд.

Литература

1. H. Haffner and O. Heckmann, *VeGoe* (1937).
2. A. Maeder, *A&A*, 32, 177, 1974.
3. J. Hurley and C. A. Tout, *MNRAS*, 300, 977, 1998.
4. M. Reggiani and M. R. Meyer, *A&A*, 553, A124, 2013.
5. A. Duquennoy and M. Mayor, *A&A*, 248, 485, 1991.
6. J. Fisher, K.-P. Schröder, and R. C. Smith, *MNRAS*, 361, 495, 2005.
7. D. Raghavan, et al., *ApJS*, 190, 1, 2010.
8. M. Moe and R. Di Stefano, *ApJS*, 230, 15, 2017.
9. P. F. L. Maxted, et al., *MNRAS*, 385, 2210, 2008.
10. A. P. Milone, G. Piotto, L. R. Bedin, A. Aparicio, et al., *A&A*, 540, A16, 2012.
11. J. Patience, A. M. Ghez, I. N. Reid, and K. Matthews, *ApJ*, 123, 1570, 2002.
12. P. Kroupa, et al., *Computational Star Formation*, IAU Symposium, volume 270, 141–149 (2011).
13. A. M. Geller, J. R. Hurley, and R. D. Mathieu, *AJ*, 145, 8, 2013.
14. R. J. Parker and M. M. Reggiani, *MNRAS*, 432, 2378, 2013.
15. G. Duchêne and A. Kraus, *Annu. Rev. A&A*, 51, 269, 2013.
16. P. Kroupa, *The Birth, Evolution and Death of Star Clusters*.
17. P. Bianchini, et al. *ApJL*, 820, L22, 2016.
18. B. W. Carroll and D. A. Ostlie, *An introduction to modern astrophysics*, (Pearson Addison-Wesley 2007), 2nd edition.
19. M. Kouwenhoven, et al. *A&A*, 493, 2009.
20. P. Marigo, L. Girardi, A. Bressan, P. Rosenfield, et al., *ApJ*, 835, 77, 2017.
21. A. F. Seleznev, et al., *Open Astronomy*, 26, 80, 2017.

О возможном объяснении трёхгорбых средних профилей радиопульсаров

А.Г. Михайленко¹, В.С. Бескин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН

Средние профили радиопульсаров разнообразны по своей структуре. При этом до сих пор это разнообразие не было полностью объяснено на количественном уровне. В этой работе, основываясь на теории распространения радиоволн в магнитосфере пульсаров, мы рассматриваем один из возможных сценариев формирования так называемых “трехгорбых” средних профилей. Эти профили выделяются тем, что имеют три пика интенсивности несмотря на то, что измерение позиционного угла линейной поляризации однозначно свидетельствует о формировании профиля за счет лишь одной из двух поляризационных мод.

Прежде всего, отметим, что плотность вторичной электронно-позитронной плазмы различается на магнитных силовых линиях, отвечающих разным точкам на полярной шапке пульсара. На качественном уровне “провал” плотности вблизи центра шапки объясняется низкой эффективностью изгибного излучения фотонов вследствие достаточно большого радиуса кривизны магнитных силовых линий вблизи магнитной оси. Количественное описание этого распределения является одной из задач данной работы.

Далее, как известно, магнитосферу пульсаров могут покидать два типа радиоволн – обыкновенная (О-мода) и необыкновенная (Х-мода). При этом О-мода примечательна тем, что при распространении испытывает преломление. Так, для случая, когда плотность плазмы слабо зависит от расстояния от магнитной оси, такое отклонение происходит в сторону от магнитной оси (Barnard & Arons, 1986). Однако, как было показано в работе Lyubarskii & Petrova (1998), при наличии сильной зависимости плотности плазмы от расстояния от магнитной оси, необходимо учитывать преломление в сторону уменьшения плотности плазмы. Этот факт с учетом распределения плотности плазмы в магнитосфере позволяет объяснить формирование “трехгорбых” профилей.

Действительно, волны, соответствующие необыкновенной О-моду, излученные снаружи от максимума распределения плотности, при распространении преломляются в направлении противоположном градиенту концентрации, то есть от магнитной оси. Такие волны естественно связать с двумя боковыми пиками среднего профиля интенсивности. Однако волны, излученные внутри от максимума плотности, должны преломляться к магнитной оси. При этом для центрального прохождения через диаграмму направленности становится возможным многократное отражение волн от плотной плазмы вдали от магнитной оси, которое в итоге и может привести к формированию центрального пика. Таково качественное описание предлагаемого сценария образования “трехгорбых” профилей.

Проведенный нами анализ каталога “трехгорбых” средних профилей, сформированных за счет лишь одной ортогональной моды, показывает, что такие профили характерны для пульсаров, находящихся вблизи “линии смерти”, то есть для “старых” пульсаров, у которых параметр $Q > 1$ (Beskin *et al.*, 1988). Для таких пульсаров рождение вторичной плазмы действительно становится возможным лишь в узкой кольцевой области в пределах полярной шапки (Ruderman & Sutherland, 1975), что как раз и необходимо для предлагаемого сценария формирования трех пиков интенсивности.

Авторы благодарят А.С.Андрианова и А.Л.Акопяна за полезное обсуждение. Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант 20-02-00469).

Литература

1. Barnard J.J. & Arons J. Wave Propagation in Pulsar Magnetospheres: Refraction of Rays in the Open Flux Zone // *Astrophysical Journal* 1986, 302, 138-162
2. Lyubarskii Y.E. & Petrova S.A. Refraction of radio waves in pulsar magnetospheres // *Astronomy and Astrophysics* 1998, 333, 181-187
3. Beskin V.S., Gurevich A.V. & Istomin I.N. Theory of radio emission of pulsars // *Astrophys. Space Sci.* 1988, 146, 205-281
4. Ruderman M.A. & Sutherland P.G. Theory of pulsars: polar gaps, sparks, and coherent microwave radiation // *Astrophys. J.* 1975, 196, 51-72

Оценка внутренних параметров струйного выброса в галактике М87 с использованием карт спектрального индекса

В.А. Фролова¹, А.С. Никонов², Е.Е. Нохрина¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Астрокосмический центр Физического института им. П.Н. Лебедева РАН

Релятивистские струйные выбросы (джеты) – это течения замагниченной плазмы из окрестностей сверхмассивных черных дыр в ядрах активных галактик [1]. В связи с существенным увеличением разрешения, впервые появляется возможность непосредственного сравнения поперечной структуры джетов с результатами наблюдений для самых близких источников. Так, недавние наблюдения в высоком разрешении показывают выраженную двух- или трёхгорбую структуру интенсивности излучения и спектрального индекса для джета в галактике М87 [2]. Это соответствует предсказаниям численного и аналитического моделирования о том, что струйные выбросы должны иметь сильно неоднородную поперечную структуру. В работе мы предлагаем способ сопоставления наблюдательных данных для галактики М87 с результатами моделирования излучения. Наш метод использует неоднородность поперечной структуры и позволяет оценить такие параметры струйного выброса, как радиус светового цилиндра R_L и полный магнитный поток Ψ_0 .

В работе моделируется синхротронное излучение с самопоглощением для цилиндрического релятивистского струйного выброса. Для этого мы рассматриваем модель струйного выброса, предложенную Бескиным [3]; для построения профилей интенсивности мы решаем уравнение переноса излучения [4].

Опишем предложенный нами способ оценки параметров струйного выброса. В рамках рассматриваемой модели в струйном выбросе имеется область, называемая центральным «кором» (central core), характеризующаяся большими значениями магнитного поля и концентрации электронов, что приводит к центральному уплощению моделируемого спектрального индекса α . Отметим, что возникновение такой области не является специфической особенностью выбранной нами модели и свойственно также другим традиционно рассматриваемым моделям джетов [5, 6], поэтому, предполагая, что центральное поднятие спектрального индекса, возникающее в наблюдениях, также связано с центральным кором, мы поступаем следующим образом. Мы определяем значение индекса P в распределении электронов по энергиям, характеризуем Лоренц-фактором γ ,

$dn = k_e \gamma^{-p} d\gamma$, пользуясь его связью со спектральным индексом в оптически прозрачной среде, $\alpha = \frac{1-p}{2}$. Затем для выбранного среза мы определяем значение параметра $B_L = \frac{\Psi_0}{R_L^2}$, дающее такую оптическую толщину среды, которая обеспечивает совпадение максимумов центральных поднятий спектрального индекса. Чтобы определить искомый срез, мы рассматриваем несколько метрик для характеристики близости центральных поднятий. Выбор оптимального среза позволяет нам определить значение радиуса светового цилиндра, что, вместе с определённым ранее значением B_L , позволяет определить и полный магнитный поток. Полученное таким образом значение радиуса светового цилиндра согласуется со значениями, полученными другими способами [7].

Укажем, от каких факторов может зависеть точность полученной нами оценки. В первую очередь, на точность оценки влияет то, корректно ли совмещены границы струйного выброса для моделируемых и наблюдаемых профилей интенсивности и спектрального индекса. В частности, полученная из наблюдений ширина струйного выброса может недооцениваться из-за малой интенсивности по краям, так как определяется с помощью аппроксимации профиля гауссианами. Также аккуратное воспроизведение особенностей излучения на краях выброса может сдвинуть получаемую оценку. Нами ведётся работа по улучшению качества воспроизведения этих особенностей.

Работа выполнена при финансовой поддержке правительства Российской Федерации (соглашение 05.Y09.21.0018).

Литература

1. Blandford R., Meier D., Readhead A. Relativistic Jets from Active Galactic Nuclei. // ARA & A. 2019. V. 57. P. 467 – 509.

2. Mertens F., Lobanov A.P., Walker R.C., Hardee P.E. Kinematics of the jet in M 87 on scales of 100-1000 Schwarzschild radii. // *Astronomy & Astrophysics*. 2016. V. 595. A54.
3. Beskin V., Chernoglazov A., Kiselev A., Nokhrina E. On the internal structure of relativistic jets collimated by ambient gas pressure. // *MNRAS*. 2017. V. 472. P. 3971 – 3978.
4. George B. Rybicki, Alan P. Lightman. Radiative Processes in Astrophysics. Wiley-VCH, 1986. 400 с.
5. Lyubarsky Y. Asymptotic Structure of Poynting-Dominated Jets. // *The Astrophysical Journal*. 2009. V. 698. P. 1570 – 1589.
6. Komissarov S.S., Vlahakis N., Königl A., Barkov M.V. Magnetic acceleration of ultrarelativistic jets in gamma-ray burst sources. // *MNRAS*. 2009. V. 394. P. 1182 – 1212.
7. Nokhrina E.E., Gurvits L.I., Beskin V.S., Nakamura M., Asada K., Hada K. M87 black hole mass and spin estimate through the position of the jet boundary shape break. // *MNRAS*. 2019. V. 489. P. 1197 – 1205.

УДК 52-853

Плазменно-пылевые процессы в атмосфере Марса

Ю.С. Резниченко^{1,2}, А. Ю. Дубинский¹, С. И. Попель^{1,2,3}

¹Институт комических исследований РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”

В работе исследуется пылевая плазма в ионосфере Марса. Предлагается самосогласованная теоретическая модель, использование которой позволяет объяснить некоторые наблюдательные данные возможностью существования в ионосфере планеты плазменно-пылевых структур, аналогичных серебристым облакам и полярным мезосферным радиоотражениям на Земле. Данная модель описывает формирование и эволюцию подобных структур как результат роста и седиментации пылевых зародышей ионосферы, а также учитывает процессы конденсации паров углекислого газа, сильно пересыщенных в области высот около 100 км. Определяются параметры подобной плазменно-пылевой системы – характерные значения размеров и зарядов пылевых частиц. Отмечается, что полученные теоретические значения хорошо согласуются с данными наблюдений.

Кроме того, в работе рассматривается распространение волн в ионосферной плазме Марса. Отмечается, что время генерации пылевых звуковых волн оказывается достаточно большим так, что возможным оказывается формирование нелинейных плазменных волновых структур, например, солитонов. Показывается, что свойства солитонов существенным образом зависят от параметров пылевой плазмы. Так, амплитуда солитона растет с увеличением концентрации пылевых частиц: увеличение концентрации пылевых частиц на порядок дает рост амплитуды также примерно на порядок. Амплитуда солитона растет и с уменьшением концентрации электронов плазмы. Уменьшение концентрации электронов на порядок приводит к росту амплитуды солитона примерно на порядок величины.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-02-00341-а) в рамках Программы № 28 фундаментальных исследований Президиума РАН “Космос: исследования фундаментальных процессов и их взаимосвязей”.

Литература

1. Klumov B.A., Popel S.I., Bingham R. Dust Particle Charging and Formation of Dust Structures in the Upper Atmosphere // *Письма в ЖЭТФ*. 2000. Т. 72. С. 524.
2. Клумов Б.А., Морфилл Г.Е., Попель С.И. Формирование структур в запыленной ионосфере // *ЖЭТФ*. 2005. Т. 127. С. 171.
3. Клумов Б.А., Морфилл Г.Е., Владимиров С.В. Особенности пылевых структур в верхней атмосфере Земли // *Письма в ЖЭТФ*. 2005. Т. 82. С. 714.
4. Дубинский А.Ю., Попель С.И. Формирование и эволюция плазменно-пылевых структур в ионосфере // *Письма в ЖЭТФ*. 2012. Т. 96. С. 22.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Часть 1. М.: Наука, 1976. 584с.
6. Извекова Ю.Н., Попель С.И. Плазменные эффекты в пылевых вихрях у поверхности Марса // *Физика плазмы*. 2017. Т. 43. С. 1010.
7. Forget F., Montmessin F., Bertaux J.L., Gonz'alez-Galindo F., Lebonnois S., Qu'emerai E., Reberac A., Dimarellis E., L'opez-Valverde M.A. The density and temperatures of the upper martian atmosphere measured by stellar occultations with Mars Express SPICAM // *J. Geophys. Res.* 2009. V. 114. P. 01004.

8. Fox J.L., Benna M., Mahaffy P.R., Jakosky B.M. Water and water ions in the Martian thermosphere/ionosphere // Geophys. Res. Lett. 2015. V. 42. P. 8977.
9. Chen F.F. // in Plasma Diagnostic Techniques, ed. by R.H. Huddleston and S.L. Leonard. New York: Academic, 1965, Chapter 4. 627p.
10. Barnes M.S., Keller J.H., Forster J.C., O'Neill J.A., Coultas D.K. Transport of Dust Particles in GlowDischarge Plasmas // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 68. P. 313.
11. 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.
12. Попель С.И., Морозова Т.И. Волновые процессы при взаимодействии хвоста магнитосферы Земли с пылевой плазмой у поверхности Луны // Физика плазмы. 2017. Т. 43. С. 474.
13. Копнин С.И., Попель С.И. Пылевые звуковые солитоны в запыленной ионосферной плазме, содержащей адиабатически захваченные электроны // Письма ЖТФ. 2019. Т. 45. С. 26.
14. Popel S.I., Kopnin S.I., Kosarev I.N., Yu M.Y. Solitons in Earth's dusty mesosphere // Adv. Space Res. 2006. V. 37. P. 414.

УДК 3937

Построение теней чёрных дыр и кротовых нор

М.А. Бугаев¹, А.А. Шелковникова², С.В. Репин³

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Физико-математическая школа № 2007

³ Астрокосмический центр ФИАН

Чёрные дыры и кротовые норы – это объекты, существование которых предсказывает общая теория относительности. Непосредственное наблюдение таких объектов невозможно, и для их экспериментального обнаружения необходимо изучать и моделировать их тени, т. е. форму и размеры областей, из которых к наблюдателю не приходит ни одного кванта.

В работе выполнено численное моделирование тени чёрной дыры на фоне аккреционного диска и распределение интенсивности излучения вблизи её силуэта при различных положениях удалённого наблюдателя. Для этого в рамках механики ОТО выполнялось интегрирование уравнений движения квантов в поле чёрной дыры в метриках Шварцшильда и Керра [1]. В результате получено большое количество модельных изображений теней для модели однородно излучающего диска и диска Новикова-Торна [2]. На рис. 1 показана тень вращающейся чёрной дыры и наблюдаемое излучение вблизи её силуэта для равномерно излучающего диска при положении наблюдателя вблизи плоскости аккреционного диска ($\vartheta = 89^\circ$). Интенсивность излучения дана в логарифмической шкале. Для сравнения на рис. 2 при тех же условиях наблюдения показана тень чёрной дыры Шварцшильда. В обоих случаях отчётливо видна яркая корона вокруг тени и асимметричная форма тени для метрики Керра. На рис. 3 и 4 те же тени показаны в меньшем масштабе, чтобы продемонстрировать искривление лучей вблизи силуэта чёрной дыры.

Для всех приведённых случаев подготовлены анимации, которые показывают, как меняется форма тени и распределение яркости в зависимости от положения наблюдателя относительно плоскости аккреционного диска.

На рис. 5 и 6 приведены результаты аналогичного моделирования для диска Новикова-Торна. Согласно этой модели, внутренняя часть диска имеет более высокую температуру и излучает пропорционально T^4 . По рисунку видно, что распределение интенсивности вблизи силуэта тени отличается от приведенного на рис. 1–4, что позволяет по наблюдениям делать выводы о структуре аккреционного диска и физических параметрах материи в нём.

Тень кротовой норы Морриса-Торна [3] во внешней области качественно похожа на тень черной дыры Шварцшильда, однако, может иметь видимые детали и внутри силуэта, и эти детали можно смоделировать только при дополнительных предположениях о распределении излучающей материи.

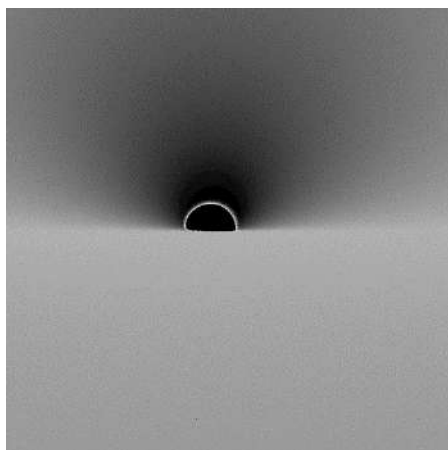


Рис.1. Тень чёрной дыры Керра

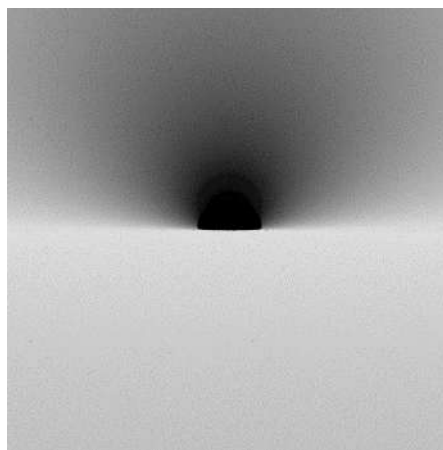


Рис.1, b. Тень чёрной дыры Шварцшильда

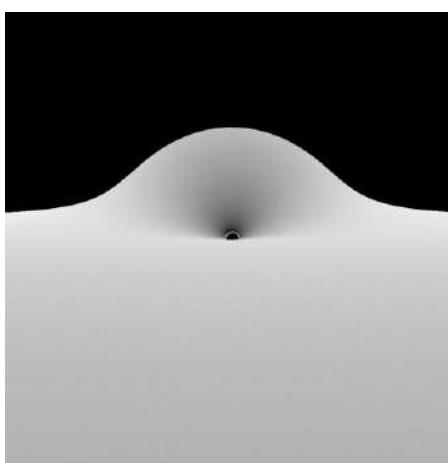


Рис.3. Тень чёрной дыры Керра
в меньшем масштабе

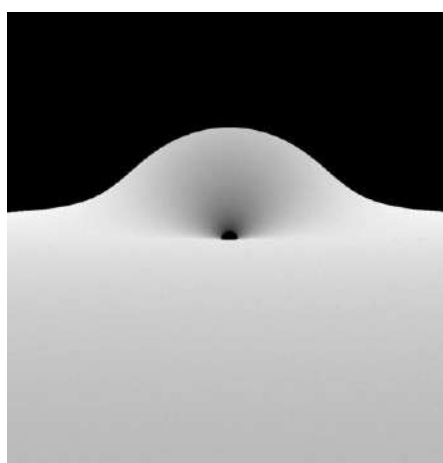


Рис.4. Тень чёрной дыры Шварцшильда
в меньшем масштабе

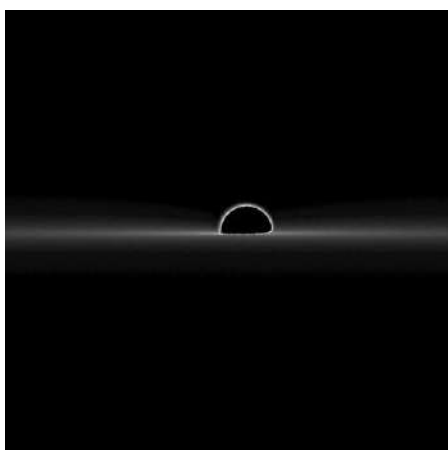


Рис.5. Тень чёрной дыры Керра с
аккреционным диском Новикова-Торна

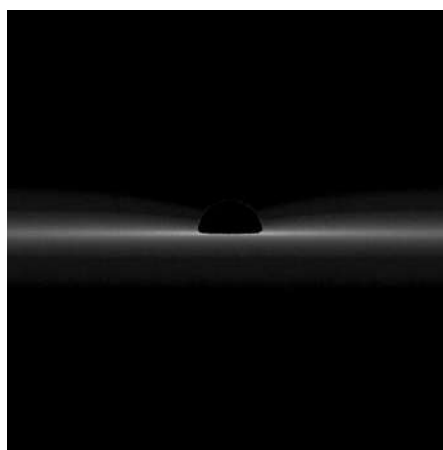


Рис.6. Тень чёрной дыры Шварцшильда с
аккреционным диском Новикова-Торна

Литература

1. Zakharov A.F., Repin S.V., Astronomy Reports, 43, issue 11, 705-717 (1999).
2. Novikov, I. D., Thorne, K. S. Black holes (Les astres occlus), p. 343-450. Edited by C. DeWitt and B. DeWitt, Gordon and Breach, N.Y. (1973).
3. Morris M.S., Thorne K.S., Am. J. Phys., 56, 395 (1988).

Трехволновые взаимодействия волн в сжимаемых вращающихся течениях мелкой воды

М.А. Юденкова^{1,2}, Д.А. Климачков², А.С. Петросян^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт космических исследований Российской академии наук

Приближение мелкой воды играет важную роль в решении задач крупномасштабной динамики атмосферы и океана. При описании течения тонкого слоя жидкости или газа со свободной поверхностью в поле силы тяжести классическая система уравнений мелкой воды является альтернативой решению полной системы гидродинамических уравнений. Однако, классическое приближение не учитывает неоднородность плотности слоя, которая возникает из-за наличия гравитации.

В работе рассматривается тонкий слой вращающейся сжимаемой жидкости. Для описания течения жидкости используется обобщение системы классических уравнений мелкой воды на случай сжимаемой жидкости:

$$\frac{\partial l}{\partial t} + \frac{\partial(lu_x)}{\partial x} + \frac{\partial(lu_y)}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(lu_x)}{\partial t} + \frac{\partial(lu_x^2)}{\partial x} + \frac{\partial(lu_xu_y)}{\partial y} + a^2g \frac{\partial l}{\partial x} - flu_y = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial(lu_y)}{\partial t} + \frac{\partial(lu_xu_y)}{\partial x} + \frac{\partial(lu_y^2)}{\partial y} + a^2g \frac{\partial l}{\partial y} + flu_x = 0. \quad (3)$$

Здесь l — поверхностная плотность слоя, u_x, u_y — усредненные по высоте слоя компоненты скорости, a — известная функция от l , f — параметр Кориолиса.

Система учитывает эффекты сжимаемости и вращение. При этом, если высота слоя жидкости будет много меньше масштаба неоднородности, система перейдет в систему классических уравнений мелкой воды [1].

Рассмотрено два вида течений: течение сжимаемой жидкости с полным учетом силы Кориолиса, то есть течение на f -плоскости, и течение на бета-плоскости, то есть когда параметр Кориолиса линейно зависит от широты: $f = f_0 + \beta y$. В линейном приближении получены дисперсионные соотношения волн в рассматриваемых течениях.

В случае полного учета силы Кориолиса получено дисперсионное соотношение для волны, соответствующей волне Пуанкаре:

$$\omega = \pm \sqrt{f_0^2 + k^2 a_0^2 g}. \quad (3)$$

Качественный анализ трехволновых взаимодействий [2] показал, что на f -плоскости невозможны слабонелинейные взаимодействия волн.

На бета-плоскости получены дисперсионные соотношения для двух видов волн (рис. 1):

$$\omega = \pm \sqrt{f_0^2 + k^2 a_0^2 g}, \quad (4)$$

$$\omega = - \frac{\beta a_0^2 g k_x}{f_0 + a_0 g k^2}. \quad (5)$$

Уравнение (4) соответствует волне Пуанкаре, а уравнение (5) — волне Россби. Волны Россби — это крупномасштабные волны, возникающие вследствие неоднородности силы Кориолиса. Они определяют динамику планетных атмосфер.

Из качественного анализа взаимодействий волн на бета-плоскости следует, что возможны трехволновые взаимодействия для двух конфигураций — трех волн Россби и двух волн Россби и волны Пуанкаре.

В работе методом многомасштабных разложений [3] получена система на амплитуды взаимодействующих волн, описывающая трехволновые взаимодействия. В результате анализа системы были исследованы параметрические неустойчивости распада и усиления. Возможны распадные неустойчивости следующих видов:

- 1) Волна Пуанкаре распадается на две волны Россби
- 2) Волна Россби распадается на волну Пуанкаре и волну Россби
- 3) Волна Россби распадается на две волны Россби

Для параметрического усиления возможны следующие конфигурации волн:

- 1) Две волны Россби усиливают волну Пуанкаре
- 2) Две волны Россби усиливают волну Россби
- 3) Волна Пуанкаре и волна Россби усиливают волну Россби

Для параметрического распада и усиления в работе найдены соответственно инкремент неустойчивости и коэффициент усиления.

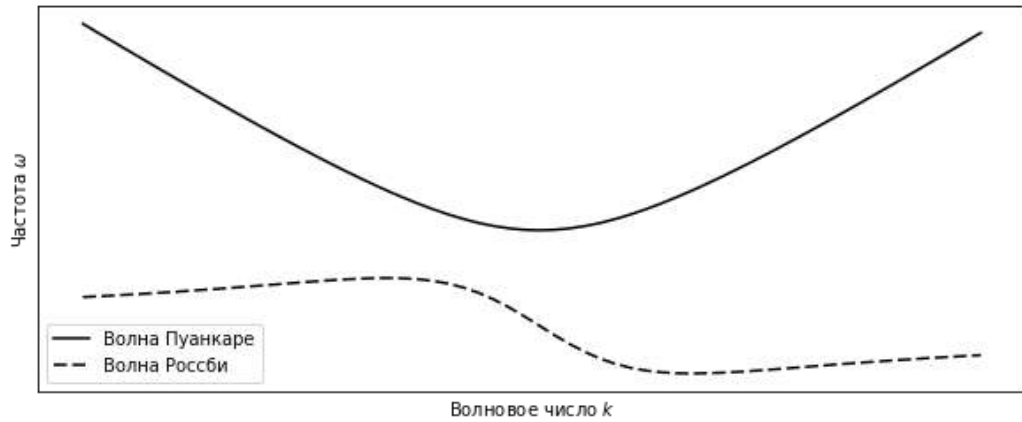


Рис.1. Графики дисперсионных соотношений для волн Пуанкаре и Россби на бета-плоскости.

Литература

1. Vallis G.K. Atmospheric and oceanic fluid dynamics. – Cambridge University Press, 2017.
2. Falkovich G. Fluid mechanics: A short course for physicists. – Cambridge University Press, 2011.
3. Ostrovsky L. Asymptotic perturbation theory of waves. – World Scientific, 2014.

Секция лазерных систем и структурированных материалов

Председатель: В.В. Глушков (д.ф.-м.н., доцент)

Зам. председателя: Е.А. Морозова (к.ф.-м.н.)

Секретарь: Е.А. Пластинин

Дата: 24.11.2020 Время: 10:00

УДК 538.958

Влияние давления на абсорбционные и транспортные характеристики синтетического меланина

И.О. Тюренов¹, К.А. Мотовилов¹, С.С. Жуков¹, З.В. Бедрень¹, П.А. Абрамов¹, А.Б. Мостерт², Б.П. Горишинов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Swansea University

Меланины - это большое семейство структурно схожих пигментов на основе индолехинонов и катехолов, которые представлены во всех царствах живых организмов, кроме вирусов. Эти соединения составляют основу ряда наиболее популярных материалов, используемых в биоэлектронике [1]. Это связано с тем, что меланины одновременно сочетают в себе свойства биосовместимости [2], относительно высокой электропроводности во влажном состоянии [3], могут быть легко синтезированы химически [4] и довольно просто образуют пленки, которые удобны для решения технологических задач [5]. На сегодняшний день наиболее хорошо изучены свойства и структуры так называемого эумеланина, который представляет собой сополимер дигидроксииндола (DHI) и дигидроксииндолкарбоновой кислоты (DHICA) в различных окислительно-восстановительных состояниях.

Мы изучили взаимосвязь между транспортными и релаксационными свойствами образцов синтетического эумеланина и величинами приложенного давления и гидратации. Результаты были интерпретированы в рамках модели, предполагающей, что в этом материале есть два основных типа частиц: небольшие жесткие ядра протомеланина и кластеры, собранные из них. В меланине, не подвергавшемся высокому давлению, наблюдается большой разброс размеров кластеров. При давлении 500 МПа и выше кластеры увеличиваются с соответствующим изменением частотных характеристик связанного с ними релаксационного процесса. Транспортные и релаксационные свойства ядер протомеланина остаются стабильными с увеличением давления и уровня гидратации. Добавление воды неизменно приводит к росту общей проводимости и диэлектрической проницаемости меланина, что связано с ростом концентрации подвижных зарядов и увеличением динамического дипольного момента кластеров. Сорбционная способность прессованного меланина снижается, что в основном связано с уменьшением расстояний между кластерами меланина. Представленные результаты интересны в связи с использованием материалов на основе меланина для создания различных устройств, в которых транспортные свойства материала играют первостепенную роль.

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФИ №19-73-10154

Литература

1. Ambrico M., Ambrico P. F., Ligonzo T., Cardone A., Cicco S. R., Lavizzera A., Augelli V. and Farinola G. M. Memory-like behavior as a feature of electrical signal transmission in melanin-like bio-polymers // Appl. Phys. Lett. 2012. V. 100. P. 253702.

2. Hong S.H., Sun Y., Tang C., Cheng K., Zhang R., Fan Q., Xu Q., Huang D., Zhao A. and Cheng Z. Chelator-Free and Biocompatible Melanin Nanoplatform with Facile-Loading Gadolinium and Copper-64 for Bioimaging // *Bioconjugate Chem.* 2017. V. 28. P. 1925–1930.
3. Motovilov K. A., Grinenko V., Savinov M., Gagkaeva Z. V., Kadyrov L. S., Pronin A. A., Bedran, E. S. Zhukova Z. V., Mostert A. B. and Gorshunov B. P. Redox chemistry in the pigment eumelanin as a function of temperature using broadband dielectric spectroscopy // *RSC Adv.* 2019. V. 9. P. 3857–3867.
4. Felix C. C., Hyde J. S., Sarna T. and Sealy R. C. Interactions of melanin with metal ions. Electron spin resonance evidence for chelate complexes of metal ions with free radicals // *J. Am. Chem. Soc.* 1978. V. 100. P. 3922–3926.
5. Sheliakina M., Mostert A. B. and Meredith P. An all-solid-state biocompatible ion-to-electron transducer for bioelectronics // *Mater. Horiz.* 2018. V. 5. P. 256–263.

УДК 538.958

Влияние допирования металлами на протонную проводимость меланина

П.А. Абрамов¹, С.С. Жуков¹, З.В. Бедрань¹, И.О. Тюренков¹, А.Б. Мостерт², К.А. Мотовилов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Swansea University

Меланины – пигменты, представляющие собой сополимеры различных производных индолхинона. Меланины широко представлены в тканях представителей всех живых царств¹, за исключением вирусов. Они привлекают огромное внимание исследователей, не только благодаря их биологическим функциям, но и уникальным физическим свойствам. Меланины обладают способностью эффективно конвертировать высокочастотные ионизирующие излучения в тепло, имеют относительно высокую электрическую проводимость, позволяющую рассматривать их в качестве органических полупроводников. За последние пять лет было показано, что меланин следует рассматривать, как смешанный ионно-электронный проводник с преобладающим протонным компонентом^{2,3}.

Меланины находят применение в различных устройствах, таких как твердотельные органические электрохимические транзисторы^{4,5}, гибкие суперконденсаторы⁶ и УФ фильтры. Потенциально вещество можно использовать для создания биосовместимых сенсоров⁷. Наиболее важным свойством для таких устройств является проводимость, зависящая от гидратации меланина.

Для принципиального улучшения свойств устройств на основе меланина требуется научиться увеличивать концентрацию протонов в данном материале. Для этого можно допировать **полииндолхиноновую** матрицу меланина ионами переходного металла, способными эффективно связываться с ионогенными группами в составе мономеров меланина, модулируя, таким образом, концентрацию свободных протонов и, как следствие, проводимость.

Для данного исследования был синтезирован эумеланин, допированный атомами *Cu(II)* с молярным содержанием 0.05, 0.5 и 1.0 ммоль/г. Порошок меланина прессовался при давлении 800 МПа в таблетки диаметром 5 мм и толщиной 0.5 мм. На образцы напылялись золотые контакты. Измерения комплексной проводимости и диэлектрической проницаемости проводились с помощью импеданс-анализатора MFIA Zurich Instruments по 4-контактной схеме.

Влажность регулировалась путем гигростатирования образцов в атмосфере паров воды над насыщенными растворами солей *LiCl*, *MgCl₂ · 6H₂O*, *NaNO₂*, *(NH₄)₂SO₄*, что соответствует относительным влажностям: 11%, 33%, 64%, 81% при комнатной температуре соответственно. Исследование проводилось в широкополосном радиочастотном диапазоне 0.1 Гц–5 МГц при комнатной температуре.

Было обнаружено, что меланин, допированный атомами *Cu(II)* демонстрирует зависимость проводимости от гидратации качественно похожую на недопированный меланин: медленный рост при низком содержании воды, а затем резкое увеличение при более высокой гидратации во всем частотном диапазоне. Однако, точка перегиба смещается для *Cu*-меланина в сторону более низкой гидратации с ростом концентрации меди. Допированные медью образцы показывают повышенную проводимость на моль адсорбированной воды.

Работа была выполнена при поддержке гранта РНФ №19-73-10154.

Литература

1. D'Alba, L.; Shawkey, M. D. *Melanosomes: Biogenesis, Properties, and Evolution of an Ancient Organelle. Physiol. Rev.* 2018, 99 (1), 1–19. <https://doi.org/10.1152/physrev.00059.2017>.

2. Mostert, A. B.; Powell, B. J.; Pratt, F. L.; Hanson, G. R.; Sarna, T.; Gentle, I. R.; Meredith, P. Role of Semiconductivity and Ion Transport in the Electrical Conduction of Melanin. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2012, 109 (23), 8943–8947. <https://doi.org/10.1073/pnas.1119948109>.
3. Bernardus Mostert, A.; Powell, B. J.; Gentle, I. R.; Meredith, P. On the Origin of Electrical Conductivity in the Bio-Electronic Material Melanin. *Appl. Phys. Lett.* 2012, 100 (9), 093701. <https://doi.org/10.1063/1.3688491>.
4. Sheliakina, M.; Mostert, A. B.; Meredith, P. An All-Solid-State Biocompatible Ion-to-Electron Transducer for Bioelectronics. *Mater. Horiz.* 2018, 5 (2), 256–263. <https://doi.org/10.1039/C7MH00831G>.
5. Mostert, A. B.; Rienecker, S. B.; Sheliakina, M.; Zierep, P.; Hanson, G. R.; Harmer, J. R.; Schenk, G.; Meredith, P. Engineering Proton Conductivity in Melanin Using Metal Doping. *J. Mater. Chem. B* 2020. <https://doi.org/10.1039/D0TB01390K>.
6. Kumar, P.; Mauro, E. D.; Zhang, S.; Pezzella, A.; Soavi, F.; Santato, C.; Ciccoira, F. Melanin-Based Flexible Supercapacitors. *J. Mater. Chem. C* 2016, 4 (40), 9516–9525. <https://doi.org/10.1039/C6TC03739A>.
7. Pezzella, A.; Wünsche, J. *Eumelanin: An Old Natural Pigment and a New Material for Organic Electronics – Chemical, Physical, and Structural Properties in Relation to Potential Applications*. In *Organic Electronics*; John Wiley & Sons, Ltd, 2013; pp 113–137. <https://doi.org/10.1002/9783527650965.ch05>.

УДК 535.53

Генерация наночастиц золота методом лазерной абляции в расплавах солей

М.И. Жильникова^{1,2}, Г.А. Шафеев^{2,3}, Е.В. Бармина², И.И. Раков², В.В. Воронов²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Федеральный исследовательский центр «Научный центр волновых исследований»

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

³Национальный исследовательский ядерный университет

Лазерная абляция золота в различных жидкостях является активной темой исследований [1–3]. Окружающие среды, используемые в экспериментах по лазерной абляции, как правило, являются жидкими при комнатной температуре. В данной работе изучалась генерация металлических наночастиц золота при лазерной абляции твердых мишеней в расплавах солей. В качестве солей использовались соли нитрата натрия NaNO_3 , нитрита натрия NaNO_2 и нитрата лития LiNO_3 с относительно низкой температурой плавления. В качестве источника лазерного излучения использовался иттербиевый волоконный лазер с длиной волны 1060–1070 нм, длительностью импульса 200 нс и энергией 1 мДж при частоте следования 20 кГц. Соли доводились до температуры плавления (диапазон от 255 до 310° С) на плитке, затем в полученную жидкость помещалась твердая мишень золота (чистота 99,99%). Затем производилась лазерная абляция при постоянной температуре 320°С. Оказалось, что в спектре экстинкции полученных твердых матриц после затвердевания (рис. 1), а затем растворенных в воде, отсутствует обычный пик плазмонного резонанса на длине волны около 520 нм. Вместо этого наблюдалось увеличение поглощения в ИК-области (длины волн от 750 до 1000 нм), что может быть связано с удлинением наночастиц под влиянием окружающих матриц [4]. Рентгеновские дифрактограммы твердых нанокомпозитов также показали наличие металлических наночастиц золота. О подобном эффекте ранее сообщалось в [5] в случае полимерной матрицы.

Работа выполнена при поддержке грантов РНФ 20-19-00419, РФФИ № 18-52-70012_е_Азия_а, № 19-02-00061 А, № 20-32-70112 Стабильность. Работа выполнена при поддержке программы президиума РАН № 5 «Фотонные технологии в зондировании неоднородных сред и биобъектов».

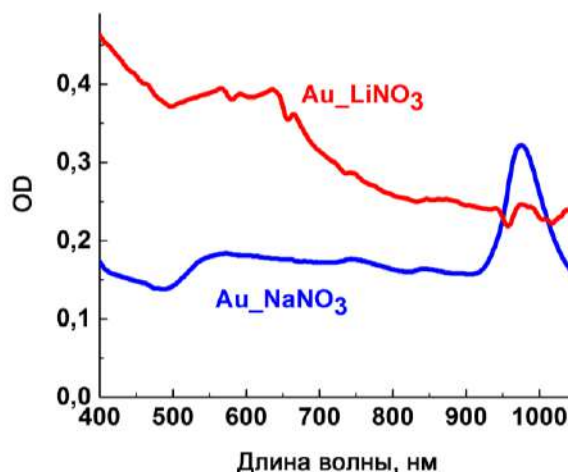


Рис. 1. Спектр экстинкции композитов наночастиц золота в твердых матрицах NaNO_3 и LiNO_3 , растворенных в воде.

Литература

1. Barcikowski S., Compagnini G., Advanced nanoparticle generation and excitation by lasers in liquids // *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2013. V. 15(9), P. 3022.
2. Amendola V., Pilot R., Frascioni M., Maragò O.M., Iati M.A., Surface plasmon resonance in gold nanoparticles: A review // *Journal of Physics Condensed Matter*. 2017. V. 29.
3. Shafeev G. Laser synthesis of nanoparticles via ablation of solids in liquids, ed. G.W. Yang, Pan Stanford. 2011. P.327.
4. Zhilnikova M., Voronov V., and Shafeev G., Laser ablation of metals in salts melts // *Chemical Physics Letters*. 2020. V. 755 P. 137778.
5. Barmina E., Mel'nik N., N, Rakov I., Shafeev G., Optical properties of nanocomposites based on polymers and metal nanoparticles // *Physics of Wave Phenomena*. 2017. V. 25 (3) P. 165.

УДК 535.4

Измерительная система на базе стабилизации средней частоты перестраиваемого лазера

Т.А. Ахметшина, Г.И. Ильин

Казанский национальный исследовательский технический университет

В ряде важных приложений используются лазеры с модуляцией выходного сигнала по частоте по определенному закону (чаще всего используются гармонический или пилообразный законы модуляции). При этом средняя частота частотно-модулированного лазера должна быть равна частоте высокостабильного опорного лазера. Целью данной работы является разработка измерительной системы на базе стабилизации средней частоты.

В работе [1] рассмотрена система стабилизации средней частоты частотно-модулированного лазера относительно частоты опорного лазера. Работоспособность предложенного способа стабилизации средней частоты лазерной системы была подтверждена экспериментально. В ходе экспериментальной проверки было отмечено, что при выключении режима изменения средней частоты лазера система переходит в режим самосинхронизации. Время нахождения в этом режиме определяется уровнем дестабилизирующих факторов. Поэтому в данной работе рассматривается возможность создания измерительной системы на базе системы стабилизации средней частоты частотно-модулированного лазера. При этом необходимо выделить два режима работы измерительной системы: режим стабилизации средней частоты относительно опорного сигнала и режим самосинхронизации при отключении системы стабилизации средней частоты частотно-модулированного лазера. Измеряемым параметром в этом режиме является время нахождения системы в режиме самосинхронизации. Очевидно, чем меньше дестабилизирующие факторы, тем больше время нахождения системы в режиме самосинхронизации. Таким образом, можно создать измерительную систему способную регистрировать низкочастотные флуктуации малой интенсивности, так как измерение производится в режиме свободной генерации.

Литература

1. Андрющенко Т.А., Ильин Г.И., Ильин А.Г. Стабилизация частоты гелий-неонового лазера на длине волны 3,39 мкм. Материалы международной конференции молодых ученых, аспирантов и студентов. « Прикладная электродинамика , фотоника и живые системы. 2016». Казань . 7 -8 февраля 2016 г. с.10-13.

УДК 543.51

Ионизация летучих органических соединений излучением лазерной плазмы

А.Б. Бухарина, А.В. Пенто

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Масс-спектрометрия летучих органических соединений (ЛОС) развивается более трех десятилетий и используется в различных отраслях знания. Одной из задач является детектирование ЛОС, выделяемых живыми организмами в процессе метаболизма. Набор этих соединений несет информацию о состоянии индивидуума, которая может быть использована для диагностики заболеваний. ЛОС относятся к различным химическим классам и отличаются потенциалом ионизации, спектром поглощения оптического излучения, энергией сродства к протону и электрону. В настоящее время в выдохе, выделениях кожи, моче и слюне человека идентифицировано более 1000 ЛОС [1]. Так как информация о состоянии организма заключается в основном в соотношении концентраций различных соединений, необходимо обеспечить эффективное детектирование максимально широкого круга последних. В этой связи актуален поиск способов получения ионов, обеспечивающих ионизацию ЛОС различных классов. Для решения этой проблемы авторами был предложен новый метод получения ионов органических соединений при атмосферном давлении, основанный на использовании жесткого УФ излучения лазерной плазмы, создаваемой импульсным лазером на поверхности металлической мишени [2]. Такой подход позволяет одновременно обеспечить фотоионизацию как молекул воды, кислорода, азота, так и любых органических соединений, не приводя к их значительной фрагментации. Это позволяет отказаться от использования газового хроматографа и использовать масс-анализатор с непосредственным вводом ионов из атмосферного давления, что позволит сократить время анализа. Для получения ионов ЛОС в работе использовалась плазма, создаваемая импульсным излучением Nd:YAG лазера с энергией в импульсе 500 мкДж, $t = 500$ пс и $F = 300$ Гц. Исследование процессов ионизации проводилось в среде аргона при атмосферном давлении. Для выяснения основных каналов ионизации и определения порога обнаружения метода проведены эксперименты для нескольких типов соединений – спиртов, кетонов, аминов и терпенов с потенциалом ионизации 7.7–12.2 эВ. Продемонстрирована возможность применения предлагаемого ионного источника для анализа ЛОС биологических образцов. Проведена оценка порога обнаружения метода на примере этанола.

Литература

1. Amann, B. de L. Costello, W. Miekisch, J. Schubert, B. Buszewski, J. Pleil, N. Ratcliffe, and T. Risby, The human volatilome: volatile organic compounds (VOCs) in exhaled breath, skin emanations, urine, feces and saliva // J. Breath Res. 2014.
2. V. Pento, S. M. Nikiforov, Y. O. Simanovsky, A. A. Grechnikov, and S. S. Alimpiev, Laser ablation and ionisation by laser plasma radiation in the atmospheric-pressure mass spectrometry of organic compounds // Quantum Electron. 2013.

УДК 537.9

Нарушение кубической симметрии в редкоземельных додекаборидах с динамическими зарядовыми страйпами

*К. М. Красиков^{1,*}, А. Н. Азаревич¹, В. В. Глушков¹, С. В. Демишев¹, А. Л. Хорошилов¹,
А. В. Богач¹, Н. Ю. Шицевалова², В. Б. Филиппов², Н. Е. Случанко¹*

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

²Институт проблем материаловедения им. И.М. Францевича НАНУ

Сильно коррелированные электронные системы (СКЭС) представляются перспективными как для практических применений, так и с точки зрения исследований фундаментальных аспектов физики конденсированного состояния [1]. Анализ природы аномалий в СКЭС, обусловленных электронным нематическим эффектом, зарядовыми страйпами и др., часто оказывается затруднен вследствие сложного химического состава и низкой симметрии кристаллической структуры. В то же время, среди различных СКЭС выделяется семейство редкоземельных (РЗ) додекаборидов RB_{12} , в которых электронная и структурная неустойчивости наблюдаются в соединениях со сравнительно простой *гцк* решеткой.

Недавние исследования особенностей кристаллической структуры и анизотропии магнетосопротивления (МС) в LuB_{12} [2] позволили обнаружить формирование динамических зарядовых страйпов вдоль направлений $\langle 110 \rangle$, что обусловлено динамическим кооперативным эффектом Яна-Теллера на кластерах $[B_{12}]^{2-}$ и связанной с этим модуляцией степени гибридизации зонных $5d-2p$ состояний. Анизотропия МС, предположительно обусловленная зарядовыми страйпами, также была обнаружена в АФ и парамагнитной фазах твердых растворов замещения $Ho_xLu_{1-x}B_{12}$ различных составов (см., например, [3]).

Классический сценарий возникновения анизотропии МС в металлах при низких температурах связан с наличием открытых траекторий на поверхности Ферми (ПФ) [4]. При этом в пределе сильного поля ($\omega_c\tau \gg 1$, ω_c - циклотронная частота, τ - время релаксации) наличие открытых траекторий на ПФ может приводить к огромной анизотропии МС при изменении ориентации магнитного поля с переходом от замкнутых к открытым орбитам электронов. Поскольку в RB_{12} дырочный лист ПФ в форме «монстра» имеет несколько групп открытых траекторий, представляет интерес выяснить природу анизотропии МС в RB_{12} и провести сравнение с аномалиями МС, обнаруженными ранее для меди с аналогичной топологией ПФ.

С этой целью в работе представлены результаты измерений температурных, полевых и угловых зависимостей МС и выполнен анализ вкладов в магнитных и немагнитных додекаборидах RB_{12} ($R = Ho, Er, Tm, Lu$) и в твердых растворах замещения на их основе.

Измерение удельного сопротивления проводилось на автоматизированной оригинальной установке для гальваномагнитных исследований в ОНТИКТ ИОФ РАН. Использовался стандартный четырехконтактный метод измерения сопротивления на постоянном токе с коммутацией тока через образец. Образец на держателе с датчиками температуры и магнитного поля в двустенной ампуле помещался в гелиевый криостат. Магнитное поле напряженностью до 8 Т создавалось сверхпроводящим соленоидом. Вращение образца с пошаговой фиксацией его положения во внешнем магнитном поле проводилось вокруг токовой оси $\mathbf{I} \parallel [1\bar{1}0]$ с шагом $\Delta\varphi = 1.8^\circ$.

Для уточнения направлений внешнего магнитного поля, отвечающих открытым и замкнутым траекториям на поверхности Ферми в LuB_{12} , в работе было проведено моделирование ПФ и анализ траекторий в обратном пространстве, возникающих для различных направлений $\mathbf{H}$. По данным измерений эффекта де Гааза - ван Альфена в LuB_{12} нами были скорректированы сечения многосвязной дырочной ПФ и восстановлена модельная ПФ (рис.1).

Проведенные исследования удельного сопротивления семейства магнитных и немагнитных РЗ додекаборидов RB_{12} установили понижение симметрии электронного транспорта при низких и промежуточных температурах, которое не может быть связано исключительно с топологией ПФ в этих металлах со структурной (эффект Яна-Теллера) и электронной (зарядовые страйпы вдоль $[110]$) неустойчивостью. Предложено объяснение анизотропии МС в терминах взаимодействия динамических зарядовых страйпов с сильным магнитным полем. В то же время, полученные в работе результаты моделирования ПФ LuB_{12} и выполненный анализ открытых и замкнутых траекторий на ПФ, позволяет предположить, что взаимосвязь между флуктуациями электронной плотности и топологией ПФ является фактором, определяющим широкий температурный диапазон и значительную амплитуду наблюдаемой анизотропии.

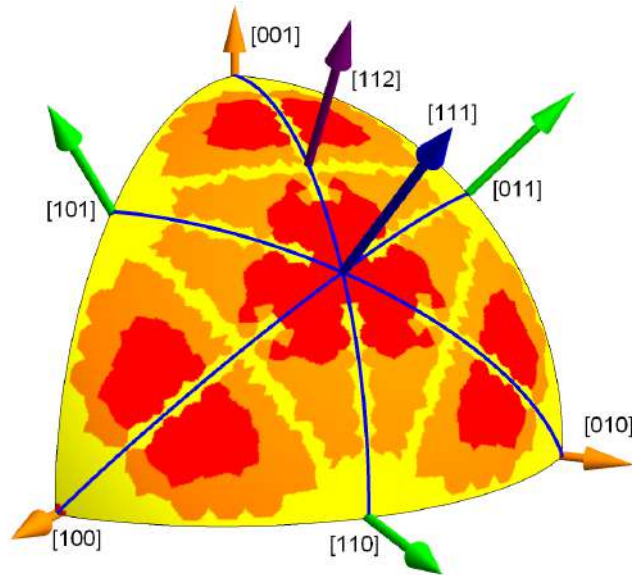


Рис. 1. Схематическое изображение направлений вектора $\mathbf{H}$ магнитного поля для ПФ LuB_{12} , приводящих к открытым траекториям (желтые области), только замкнутым траекториям (красные области) и замкнутым, но распространяющимся на 10 и более зон Бриллюэна в обратном пространстве траекториям (оранжевые области). Стрелками обозначены основные направления в ггк решетке.

Работа выполнена при поддержке грантов Российского научного фонда (№ 17-12-01426) и Российского фонда фундаментальных исследований (№ 18-02-01152). Авторы признательны В.Н. Краснорусскому за помощь в эксперименте и полезные обсуждения.

Литература

1. *Elbio Dagotto*, Science 309, 257 (2005)
2. *N. B. Bolotina, A. P. Dudka, O. N. Khrykina, V. N. Krasnorussky, N. Y. Shitsevalova, V. B. Filipov, and N. E. Sluchanko*, J. Phys. Condens. Matter, **30**(26), p. 265402, (2018).
3. *A. L. Khoroshilov, V. N. Krasnorussky, K. M. Krasikov, A. V. Bogach, V. V. Glushkov, S. V. Demishev, N. A. Samarin, V. V. Voronov, N. Y. Shitsevalova, V. B. Filipov, S. Gabáni, K. Flachbart, K. Siemensmeyer, S. Y. Gavrillkin, and N. E. Sluchanko*, Phys. Rev. B, **99**(17), p. 1, (2019).
4. *D. Shoenberg*, Magnetic Oscillations in Metals. Cambridge University Press, Cambridge, 2009.

УДК 537.9

Численное моделирование фемтосекундного KLM-лазера с диодной накачкой

А.А. Колосветов^{1,2}

¹Российский Квантовый Центр

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рассмотрен фемтосекундный $\text{Ti:Al}_2\text{O}_3$ лазер в режиме пассивной синхронизации мод в условиях прямой двусторонней диодной накачки. Моделирование проводилось в параксиальном приближении при помощи комплексных ABCD-матриц с параметром q в качестве основной характеристики обобщенного гауссова пучка [1].

$$\frac{1}{q(z)} = \frac{1}{R(z)} + \frac{i}{k\omega(z)^2}; \begin{pmatrix} q' \\ 1 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} q \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}; \omega(z) = \frac{W(z)}{M_2}$$

Здесь R , ω – радиус кривизны и ширина лазерного пучка, k – волновое число, M – матрица гауссова оптического элемента, W – ширина идеального гауссова пучка, z – координата вдоль оси резонатора, M_2 – параметр, характеризующий качество обобщенного гауссова пучка. Для учета эффекта Керра в $\text{Ti:Al}_2\text{O}_3$ кристалл был представлен как большое число (10^2 - 10^3) тонких слоев – керровских линз.

$$\delta\varphi = 2\pi\delta n l/\lambda; F^{kerr} \approx A \frac{T_{FWHM}}{E} \omega^4; \quad (1)$$

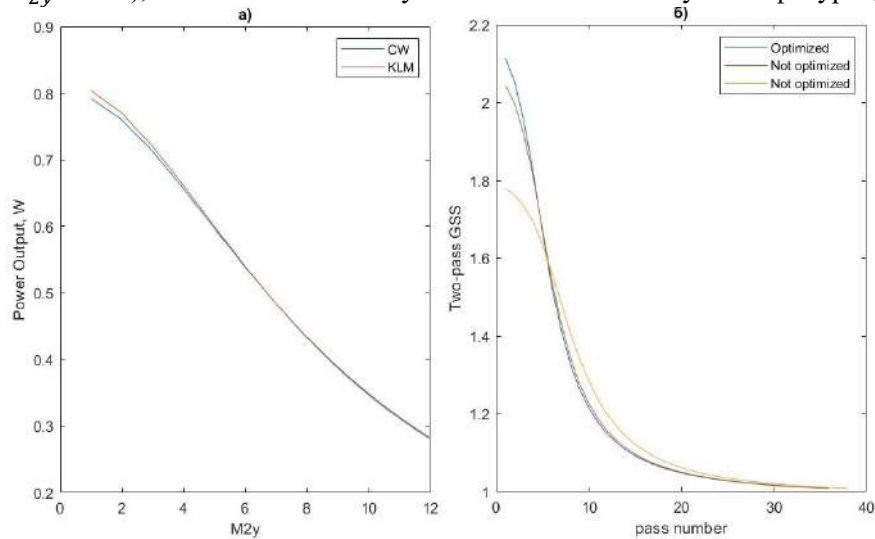
Здесь $\delta\varphi$ – сдвиг фазы за счет эффекта Керра, δn – приращение коэффициента преломления, F^{kerr} – фокусное расстояние керровской линзы, T_{FWHM} , E – длительность и энергия лазерного импульса. Стабильность резонатора при наличии линзообразного эффекта Керра достигалась за счет итеративного вычисления параметра пучка с постепенным уменьшением длительности импульса T_{FWHM} . Заметное влияние на лазерную моду резонатора оказывали дисперсия групповой скорости $\beta_2 = \frac{d}{d\omega} \left(\frac{1}{v_g} \right)$ и гауссова апертура накачки [2]. Новый комплексный параметр $\frac{1}{p} = -\alpha + \frac{i\beta_2}{T_{FWHM}^2}$, где α – параметр линейной частотной модуляции, был введен для описания увеличения длительности импульса из-за дисперсии групповой скорости. Комплексная матрица гауссовой апертуры:

$$M_{Im} = \begin{bmatrix} \cos\tilde{\gamma}\Delta z & (n_0\tilde{\gamma})^{-1}\sin\tilde{\gamma}\Delta z \\ -n_0\tilde{\gamma}\sin\tilde{\gamma}\Delta z & \cos\tilde{\gamma}\Delta z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & L/n_0 \\ -i\frac{\lambda_0 g_0}{\pi\omega_p^2} & 1 \end{bmatrix} \quad (2)$$

Где M_{Im} – комплексная ABCD-матрица гауссовой апертуры, λ_0 – длина волны в вакууме, g_0 – коэффициент усиления интенсивности в активной среде, ω_p – ширина пучка накачки на высоте $1/e$ по интенсивности, $\tilde{\gamma}^2 = k_2/k_0$; $k(x) = \sqrt{k_0^2(x) - k_2 k_0 x^2}$ – волновое число, L – длина кристалла. Выходная мощность лазера была найдена в результате численного интегрирования по поперечному сечению пучка уравнения интенсивности в активной среде [3]:

$$\frac{dI_c}{dz} = \frac{g_0 I_c}{s I_c + 1} - \alpha_c I_c \quad (3)$$

Здесь I_c – интенсивность резонаторной моды, α_c – удельные потери на единицу длины в материале, s – параметр насыщения. Значение выходной мощности, полученное экспериментально ~ 300 мВт (мощность накачки $P_{pump} = 4$ Вт, $FOM = 250$, $n_0 = 1,76$, $n_2 = 3 \cdot 10^{-14} \frac{\text{мм}^2}{\text{Вт}}$, $L = 5$ мм, $T_{FWHM} = 30$ фемтосекунд, длина волны накачки $\lambda_{pump} = 470$ нм, длина волны резонаторной моды $\lambda_{cav} = 800$ нм, $M_{2x} \times M_{2y} = 3 \times 9$), сравнивалось с результатами численного интегрирования уравнения (3). На рис. 1а изображена зависимость выходной мощности лазера от параметра качества пучка M_{2y} в CW и KLM-режимах. На рис. 1б показана зависимость коэффициента усиления ($G_{ss} = \frac{P(n)}{P(n-1)}$, где P – выходная мощность, n – номер прохода) от номера прохода для оптимизированной и не оптимизированной конфигураций резонатора. Моделирование обосновало возможность получить высокую выходную мощность лазера (~ 300 мВт) даже при низком качестве пучков накачки ($M_{2x} \times M_{2y} = 3 \times 9$), а так же позволило установить оптимальную конфигурацию резонатора.



Литература

1. Siegman A. E. How to (Maybe) Measure Laser Beam Quality. Edward L. Ginzton Laboratory, Stanford University 1998
2. François Salin and Jeff Squier, "Gain guiding in solid-state lasers," Opt. Lett. 17, 1352-1354 (1992)
3. Alfrey A. J. Modeling of Longitudinally Pumped CW Ti: Sapphire Laser Oscillators IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 25, No. 4, April 1989

Секция моделирования кинетических и ядерных процессов

Председатель: Ю.Ю. Клосс (д.ф.-м.н., доцент)

Зам. председателя: В.Ф. Цибульский (д.т.н., профессор)

Секретарь: С.С. Ситников

Дата: 26.11.2020 Время: 10:30

УДК 533.6.011

Анализ влияния примесных газов на выходные характеристики термоэмиссионных реакторов-преобразователей

А.Н. Оразбаев¹, П.А. Татауров², Д.О. Михайлов²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²НИЦ "Курчатовский институт"

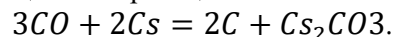
Развитие космической техники требует разработки и создания источников энергоснабжения электронной аппаратуры, электроракетных двигателей и т.д., размещаемых на борту космических аппаратов. Эти задачи могут быть решены с помощью термоэмиссионных реакторов-преобразователей (ТРП) на тепловых и промежуточных нейтронах [1]. Наряду с космическим применением, ТРП могут быть использованы в корабельных ЯЭУ и глубоководных автономных необитаемых аппаратах.

Одним из элементов ТРП является электрогенерирующий канал (ЭГК), содержащий вентилируемый твэл с ядерным топливом на основе диоксида урана [2]. Для отработки и обоснования конструкции ЭГК проводятся его испытания в петлевом канале ядерного реактора [3].

В процессе испытаний петлевого канала с многоэлементным ЭГК с сообщающимися полостями межэлектродного зазора (МЭЗ) и твэл продукты деления и их соединения, находящиеся в газовой фазе топливной полости, посредством газовой диффузии в парах цезия попадают сначала в МЭЗ через газоотводное устройство (ГОУ), ловушку, газоотводящий тракт, а затем в вакуумно-цеэиевую систему (ВЦС), генератор паров рабочего тела (ГПРТ) и линию откачки [3,4].

Присутствие в МЭЗ молекул СО в больших концентрациях может снижать выходные характеристики ЭГК. Это происходит вследствие увеличения работы выхода эмиттера в цезии при адсорбции СО и увеличения работы выхода коллектора за счет образования пленок конденсата из углерода и карбоната цезия на коллекторе в условиях протекания реакции взаимодействия СО с парами цезия при температурах ниже 1000К. В генераторе пара рабочего тела (ГПРТ) как раз и реализуются такие температуры. ГПРТ петлевого канала (ПК) предназначен для подачи пара цезия и поддержания стабильного давления цезия в термоэмиссионном электрогенерирующем канале (ЭГК) в процессе реакторных испытаний. Он также должен обеспечивать удаление примесных газов (СО, Н₂, CsOH) и газообразных продуктов деления, в частности, радионуклидов криптона и ксенона из межэлектродного зазора (МЭЗ) ЭГК с сообщающимися полостями МЭЗ и твэл в течение всего ресурса испытаний.

Примесные газы, в частности, монооксид углерода взаимодействует 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.

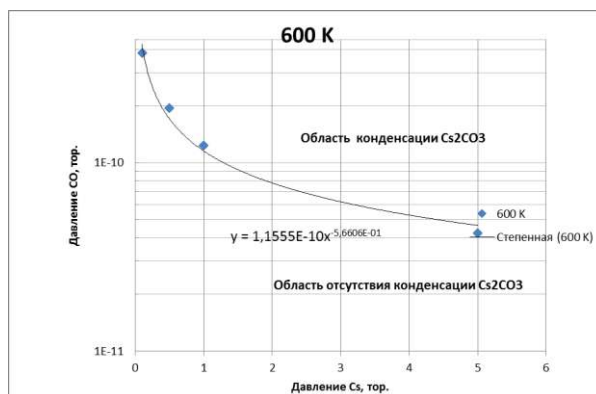


Рис. 1. Область конденсации Cs_2CO_3

Для проведения расчетов была реализована программа решающая уравнение Больцмана методом конечных разностей, для задания пространственной сетки используется генератор сеток GMSH, который позволяет разбивать сетку междупараллельными узлами [6].

Такой метод решения уравнения Больцмана позволяет ускорить расчеты при использовании одновременных вычислений в разных пространственных ячейках и последующей синхронизацией значений между ними.

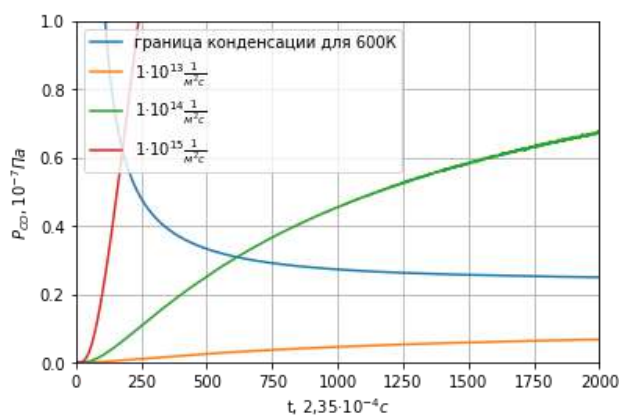


Рис. 2. Изменения давления СО для разных потоков. Граница конденсации для давлений СО.

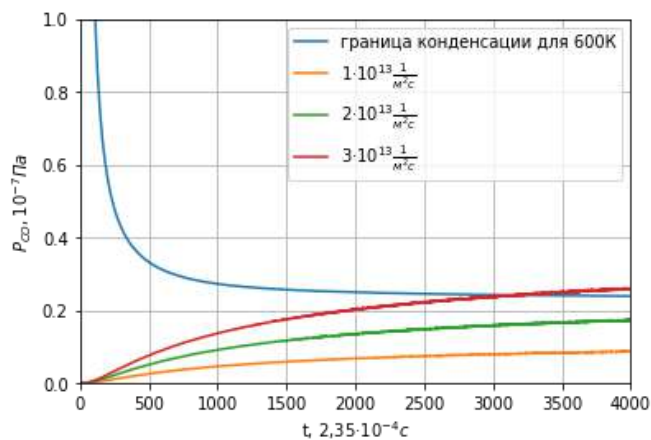


Рис. 3. Измерение на больших временах и близких к конденсации потоках СО

Было проведено численное моделирование и визуализация данных поведения газа Cs и примесных газов (CO) в пусковом режиме в ГПРТ. Установлен максимальный поток при котором отсутствует конденсация продуктов взаимодействия Cs и примесных газов на стенках и отверстиях в испарителе ГПРТ.

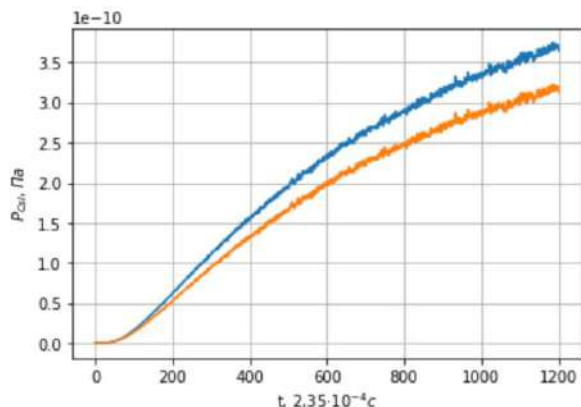


Рис. 4. Изменение давления - парциальное CsI133+CsI138 и CsI133

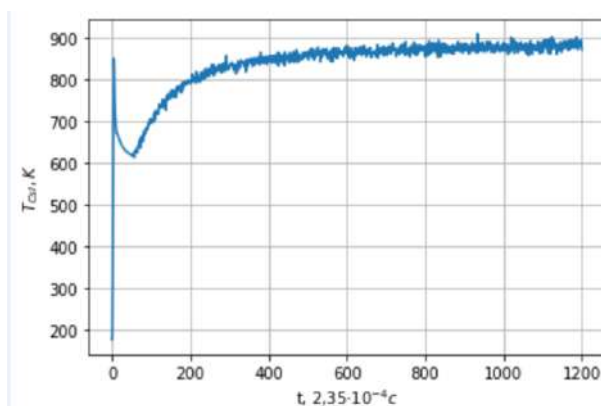


Рис. 5. Изменение температуры CsI

Требуемые давления для конденсации CsI (~10 Па) на несколько порядков меньше в установившемся режиме CsI (~10e-10 Па).

Исследования проводились при финансовой поддержке Российского фонда федерального имущества (проект № 19-08-00386, 20-08-00211) и НИЦ «Курчатовский институт» (приказ № 1919 от 14.08.2019 г.).

Литература

1. Васильковский В.С., Андреев П.В., Зарицкий Г.А., и др. Проблемы космической энергетики и роль ядерных энергетических установок в их решении. Международная конференция "Ядерная энергетика в космосе-2005". Москва-Подольск 1-3 марта 2005г. Сборник докладов, т.1, с.20-25. ФГУП НИКИЭТ, М-Подольск, 2005.
2. Выбыванец В.И., Гонтарь А.С., Еремин С.А. и др. Базовый электрогенерирующий канал двухрежимных термоэмиссионных ЯЭУ. Научно-технические проблемы разработки и создания. – В сб.: Межд. конф. «Ядерная энергетика в космосе-2005». Москва-Подольск, 2005, т.1, с.79 – 82.
3. Синявский В.В. Методы и средства экспериментальных исследований и реакторных испытаний термоэмиссионных электрогенерирующих сборок. М.: Энергоатомиздат. 2000. 375 с.
4. Гонтарь А.С., Гриднев А.А., Любимов Д.Ю. Анализ физико-химических процессов в многоэлементном ЭГК с сообщающимися полостями твэла и межэлектродного зазора. Атомная энергия, т.104, вып.4, апрель 2008, с.216-224.
5. Любимов Д.Ю., Федик И.И., Шумилов А.А. Влияние продуктов деления на выходную мощность термоэмиссионных ЭГК с сообщающимися и разделенными полостями твэла и межэлектродного зазора. Атомная энергия, т.110, вып. 6, 2011, с.321-327.
6. Басалаев А.А., Клосс Ю.Ю., Любимов Д.В., Квасов И.Е., Шувалов П.В., Щербаков Д.В., Захаров А.А. Анализ динамики поведения радионуклидов в термоэмиссионном преобразователе ЯЭУ на основе решения уравнения Больцмана на кластерной архитектуре.

Аналитическая модель предельно сильной ударной волны с неизотропными кинетическими температурами

М.М. Кузнецов^{1,2}, Ю.Д. Кулешова¹, А.А. Перов¹, И.В. Демидов¹

¹Московский государственный областной университет

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Ранее в работе Г. Грэда [1] была предложена строгая асимптотическая модель ударной волны с предельным сжатием, использующая аналитическое представление однозначной функции распределения по тепловым скоростям молекул. Это аналитическое представление являлось по существу обобщением молекулярного распределения Тамма – Мотт Смита на случай предельного сжатия в ударной волне при $M \rightarrow \infty$ (M – число Маха свободного потока, набегающего на ударную волну). При этом особенность, возникающая в сверхзвуковой части функции распределений молекул, обусловленная стремлением в нуль температуры свободного гиперзвукового потока перед волной, аналитически представлялась в виде дельта-функции от скоростей молекул. В ходе последующей эволюции сверхзвуковой («холодной» части функции распределения) в процессе сжатия в ударной волне менялась только парциальная концентрация этой «дельта» - образной части распределения.

Вторая же («горячая хвостовая» часть функции распределения) в принципе, могла быть точно рассчитана, из решения Больцмана в ударной волне. Однако, в теоретических исследованиях ее, как правило, аппроксимируют: Максвелловскими или Навье – Стоксовскими распределениями, с меняющимися макро параметрами. [2].

В настоящей работе при аппроксимации дозвуковой части распределения молекул учитывается анизотропия поля кинетических температур в ударной волне, как известно достоверно установленная, как теоретически, так и практически. На этой основе в данной работе удалось получить аналитические распределения макропараметров в ударной волне (в частности, распределения температур). Получены, так же аналитические представления функций распределения по относительным тепловым скоростям пар молекул, необходимых для вычисления поступательно-неравновесных констант скоростей неупругих бимолекулярных соударений в ударной волне. Эти новые результаты, учитывающие неизотропию поля кинетических температур, непрерывно переходят в ранее известные, полученные для изотропных распределений. [3].

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 20-07-00740 А.

Исследование выполнено в рамках гранта Президента РФ для молодых учёных – кандидатов наук МК-1330.2020.9.

Литература

1. Grad H. Limits of solution of the Boltzman equation. Transport theory SIAM-AMS, proceedings, 1966, v. I, № 20, p, 269-308
2. Turcotte D.Y. and Scholnick T.M. Structure of Strong Shock Wave The Physics of Fluids, Supplement T, 1969, p.79-82
3. Кузнецов М.М., Кулешова Ю.Д., Перов А.А., Смотров Л.В. Эффект высокоскоростного перехлеста в ударной волне с предельным сжатием // Вестник МГОУ, серия «Физика и математика», 2019, №3, с.76-81

Асимптотическая модель ударно-сжатой трехкомпонентной смеси газов

М.М. Кузнецов^{1,2}, Ю.Д. Кулешова¹, А.А. Перов¹, И.В. Демидов¹

¹Московский государственный областной университет

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рассмотрена аналитическая модель эффекта высокоскоростного перехлеста внутри фронта сильной ударной волны, ранее обнаруженного в экспериментальных исследованиях ударной волны и в расчетах ее структуры численными методами прямого статистического моделирования.

Термин «перехлест» утвердился в научной литературе, посвященной этому вопросу, начиная с 60-х годов прошлого века. Этот эффект заключается в заметном превышении значений ряда

характеристик газов внутри фронтов ударных волн по сравнению с их равновесными значениями за фронтами. Вначале этот эффект был установлен как экспериментально, так и в численных расчетах только для среднестатистических параметров газа (например, температуры). В дальнейшем он был установлен расчетным образом и для статистических распределений пар молекул по их относительным хаотическим скоростям [1].

Как было установлено численно эффект перехлеста для максимумов функций распределений пар молекул по их относительным скоростям оказался наиболее заметным в трех-компонентных сильно диспергированных газовых смесях, состоящих из преобладающего по составу смеси легкого газа-носителя (например H_2 , He, Ne и т.д.) и малых количеств двух остальных тяжелых газов (Ar, C_{60} , C_{70} и т.д.). В настоящей работе асимптотическое рассмотрение проблемы перехлеста использовано в двух смыслах: как асимптотически большое (или наоборот, асимптотически малое) различие по величинам молекулярных масс компонентов смеси и их концентрациям и как гиперзвуковое приближение в проведении аналитических оценок эффекта перехлеста.

В результате было получено хорошее совпадение с полученными ранее численно результатами [2].

Однако наиболее существенным является то, что аналитические оценки получены на основе асимптотически точных представлений функций распределения пар молекул по их относительным скоростям.

Рассмотрен также приближенный вариант строгой асимптотической модели Г. Грэда для бесконечной сильной ударной волны, известный под названием «пучок - сплошная среда». Получены аналитические представления для функции распределения по относительным скоростям молекул компонентов смеси газов.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 20-07-00740 А.

Исследование выполнено в рамках гранта Президента РФ для молодых учёных – кандидатов наук МК-1330.2020.9.

Литература

1. Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Черешнев С.Л. Распределение молекулярных скоростей во фронте ударной волны в газовых смесях // Известия АН СССР, МЖТ, 1990, №2, с. 144-150
2. Кузнецов М.М., Кулешова Ю.Д., Перов А.А., Смотров Л.В. Эффект высокоскоростного перехлеста в ударной волне с предельным сжатием // Вестник МГОУ, серия «Физика и математика», 2019, №3, с.76-81

УДК 539.173

БОНУС – модель нуклидной кинетики в составе интегрального ПрЭВМ СОКРАТ/ВЗ: модернизация, верификация

Е.А. Долженков¹, А.Е. Киселев¹, Д.Ю. Томащук¹

¹Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Цель работы – получение с приемлемой точностью данных о нуклидном составе UO_2 -топлива, достигающего выгорания до $70 \text{ МВт} \times \text{сут}/\text{кгU}$, а также данных о мощности остаточного тепловыделения (ОТВ) при временах выдержки до 10 лет для РУ типа ВВЭР.

Проблема прецизионного расчета изменения нуклидного состава топлива в процессе работы РУ и после ее останова требует решения комплексной пространственно-временной нейтронно-физической задачи с учетом различных процессов, протекающих в активной зоне РУ, и особенностей конструкции РУ. Существует ряд ПрЭВМ (SCALE (ORNL), РАДИОНУКЛИД (КИ), ORIGEN2 (ORNL) и др.), решающих эту задачу, однако их использование в составе интегрального ПрЭВМ, предназначенного для расчета распределения и состава материалов в пространстве-времени в результате физико-химических процессов, не представляется возможным в связи с большим временем расчета ($\sim 10^2$ - 10^4 с).

Для экспресс-оценки (~ 1 с) нуклидного состава топлива, достигающего выгорания $\sim 40 \text{ МВт} \times \text{сут}/\text{кгU}$, а также мощности ОТВ при временах выдержки до 1 года, в ИБРАЭ РАН была разработана модель и на ее основе модуль БОНУС, который успешно эксплуатировался в линейке интегральных ПрЭВМ СОКРАТ (В1, В3, БН). Однако в связи с непрерывно растущими требованиями к ПрЭВМ, как к инструментам для обоснования безопасности ОИАЭ, в последние годы воз-

ника необходимость в модернизации существующей модели с целью увеличения перечня рассчитываемых нуклидов (актиноидов и продуктов деления) и точности расчета их концентрации в топливе, а также с целью увеличения точности расчета мощности ОТВ на более широком интервале времен выдержки.

В докладе представлены основные результаты работ по модернизации модуля БОНУС, выполненные в ходе подготовки к аттестации и устранения замечаний экспертизы к ПрЭВМ СОКРАТ/ВЗ.

Модернизация включала расширение перечня актиноидов, совершенствование подготовки входных данных (в том числе, библиотеки микроконстант) и разработку алгоритма учета изменения библиотеки микроконстант с выгоранием топлива, что позволило учитывать изменение спектра нейтронов в топливе при работе реактора на мощности.

Перечень моделируемых актиноидов расширен с 8 до 21. Дополнительно включены в рассмотрение ^{237}U , $^{237,238,240}\text{Np}$, $^{238,242,243}\text{Pu}$, $^{241,242,243,244}\text{Am}$, $^{242,244}\text{Cm}$, что позволило учесть большее количество каналов образования и увода актиноидов и тем самым увеличить точность расчета концентраций всех нуклидов и мощности ОТВ, в которую при временах выдержки более 1 года актиноиды вносят существенный вклад.

Совершенствование подготовки входных данных (в том числе, библиотеки микроконстант) и разработка алгоритма учета изменения библиотеки микроконстант с выгоранием топлива выполнены в виде двух опций:

- опция 1 – подготовить библиотеку микроконстант для свежего UO_2 -топлива и вспомогательную библиотеку коэффициентов, которые являются множителями на микроконстанты и изменяются с выгоранием топлива;
- опция 2 – считывать из входного файла табулированные зависимости микроконстант от выгорания топлива, предварительно подготовленные с помощью сторонней ПрЭВМ.

Для расчета с использованием опции 1 была разработана методика подготовки библиотеки микроконстант для свежего UO_2 -топлива и библиотеки коэффициентов. Для этого в качестве источника данных использовалась web-версия ПрЭВМ JANIS 4 (Java-based Nuclear Data Information System (АЯЭ ОЭСР) [2]), представляющая собой набор библиотек оцененных ядерных данных с интерфейсом для их визуализации, и содержащая, в том числе, табулированные зависимости микроконстант от энергии нейтрона. В качестве инструмента для их обработки использовалась ПрЭВМ NJOY (Nuclear Data Processing System (LANL)), которая позволяет получать одно- и многогрупповые микроконстанты для конкретной РУ, учитывая при этом некоторые ее параметры: нуклидный состав свежего топлива, спектр нейтронов, водно-топливное отношение, температуру топлива.

Выполнена всесторонняя верификация ПрЭВМ СОКРАТ/ВЗ с модернизированной моделью БОНУС. В матрицу верификации вошли: аналитические тесты, кросс-верификация с ПрЭВМ РАДИОНУКЛИД и ORIGEN2, валидация на данных по накоплению актиноидов и продуктов деления в ОЯТ из открытой базы данных SFCOMPO2.0 (АЯЭ ОЭСР) [3]. Результаты тестирования показали хорошее соответствие результатов расчета и аналитических функциональных зависимостей, результатов расчетов по другим ПрЭВМ, а также результатов измерений.

Сравнение результатов расчетов, полученных с помощью исходной и модернизированной версий модели БОНУС, показало существенное увеличение точности расчета: погрешность расчета концентрации актиноидов и продуктов деления в топливе, достигнувшем выгорания до $70 \text{ МВт} \times \text{сут} / \text{кгU}$, – не более 25%; погрешность расчета мощности ОТВ на интервале времен выдержки до 10 лет – не более 10%.

Литература

1. В.И. Тарасов. «Пакет БОНУС 1.2. Нарботка радионуклидов в ректорах на тепловых нейтронах. Руководство пользователя». Отчет ИБРАЭ РАН, NSI-SARR-137-2002.
2. Интернет-ресурс: <https://www.oecd-nea.org/janisweb/>
3. Интернет-ресурс: https://www.oecd-nea.org/jcms/pl_21515/sfcompo-2-0-spent-fuel-isotopic-composition

Влияние преципитатов на теплопроводность нитридного топлива

А.В. Задорожный, В.Д. Озрин

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики
Российской академии наук (ИБРАЭ РАН)

Представлены результаты моделирования поведения смешанного нитридного уран-плутониевого топлива с примесью кислорода и углерода при облучении в быстром реакторе БН-600, которые показали, что накопление продуктов деления и образование вторичных фаз приводит к образованию гетерогенного многокомпонентного твердого раствора, включающего, в частности, вторичные фазы металла, теллурида, оксида, интерметалла и полуторного нитрида. Накопленные продукты деления и образованные вторичные конденсированные фазы в процессе эксплуатации непосредственно влияют на теплофизические свойства ядерного топлива, в частности на его теплопроводность.

Рассмотрена эволюция теплопроводности топлива под действием облучения в рамках обобщенной теории теплопроводности [1], в которой вводится эффективная теплопроводность гетерогенной системы с изолированными включениями (преципитатами). Трехкомпонентная система состоит из связующего материала – топливной матрицы, в которой случайным образом распределены изолированные включения двух типов 1 и 2, не контактирующих друг с другом (рис. 1). Разнообразие форм преципитатов не учитывается.

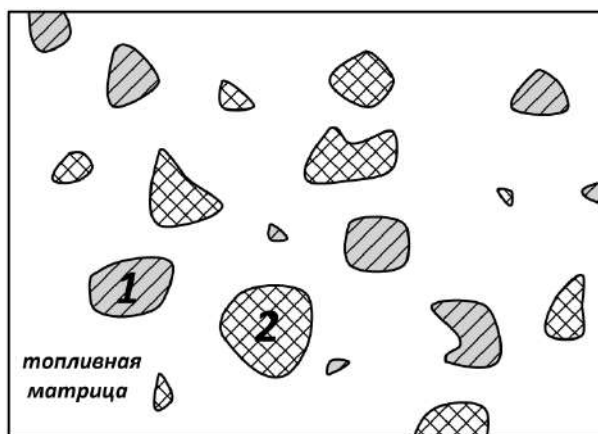


Рис. 1. Гетерогенная трехкомпонентная система с изолированными включениями двух типов

Эффективная теплопроводность гетерогенной трехкомпонентной системы может быть представлена в виде [2]:

$$\lambda_{эфф} = \lambda_m \cdot \left\{ \frac{V_1}{1-V_m} \left[1 - (1-V_m) \cdot \left(\frac{1}{1-\lambda_1/\lambda_m} - \frac{V_m}{3} \right)^{-1} \right] + \frac{V_2}{1-V_m} \left[1 - (1-V_m) \cdot \left(\frac{1}{1-\lambda_2/\lambda_m} - \frac{V_m}{3} \right)^{-1} \right] \right\}, \quad (1)$$

где λ_m , λ_1 и λ_2 – коэффициенты теплопроводности однородной матрицы и включений типа 1 и 2 соответственно, а V_m , V_1 и V_2 – объемные доли однородной матрицы и включений типа 1 и 2 соответственно.

Моделирование поведения смешанного нитридного уран-плутониевого топлива с примесью кислорода и углерода при облучении в быстром реакторе проводилось с помощью топливного расчетного кода MFPR. На рис. 2 представлены полученные в расчете объемные доли вторичных фаз облученного смешанного нитридного топлива. Видно, что при выгорания выше 1–2 % тяж.ат. осн. вклад в дополнительный объем системы дают включения двух фаз: U_2N_3 и металлической.

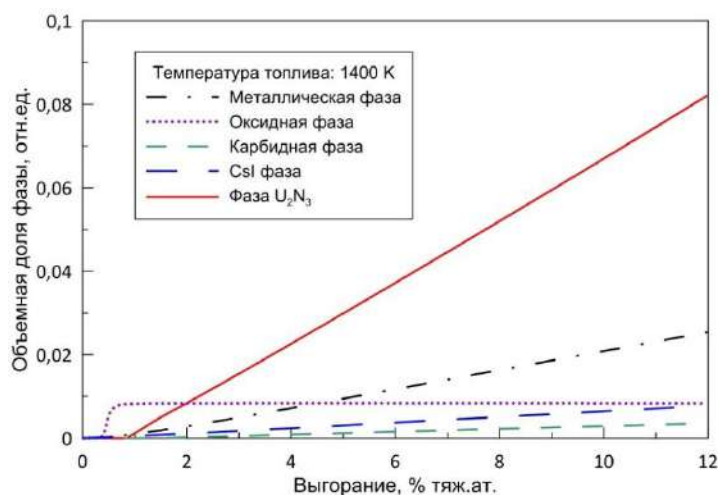


Рис. 2. Накопление вторичных фаз в процессе выгорания нитридного топлива

На рис. 3 представлена оценка теплопроводности по модели (1) для смешанного нитридного топлива, облученного в реакторе БН-600. Обозначения на рис. 3 совпадают с обозначениями переменных в выражении (1). Из полученных результатов следует, что по мере роста выгорания и накопления фазы U_2N_3 в матрице $(U, Pu)N$ теплопроводность гетерогенной системы снижается.

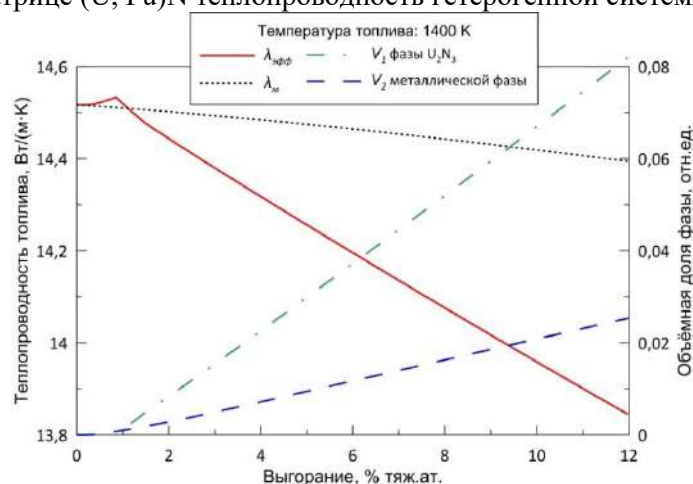


Рис. 3. Изменение теплопроводности и содержания вторичных фаз нитридного топлива в процессе выгорания

Литература

1. *Одеlevский В.И.* Расчет обобщенной проводимости гетерогенных систем // Журнал технической физики. 1951. Т. 21. вып. 6. с. 667–685.
2. *Дульнев Г.Н., Заричняк Ю.П.* Теплопроводность смесей и композиционных материалов. — Ленинград: Энергия, 1974. 264 с.

УДК 519.876.5

Влияние степени структурного разупорядочения на радиационную стойкость монокристаллов флюоритов

С.Э. Саркисов¹, В.А. Юсим¹, Е.Л. Остапов¹, А.В. Сакмаров¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

Путем расчета энергий решеток, на примере, простых CaF_2 и смешанных $Ca_{1-x}Y_xF_{2+x}$ кристаллов показана возможность численного определения начала структурного разупорядочения смешанных кристаллов бинарных кристаллохимических систем, образующих непрерывный ряд твердых растворов. В рамках электростатической модели межионных кулоновских взаимодействий рассмотрена возможность объяснения влияния, образующихся в нестехиометрических фазах $Ca_{1-x}Y_xF_{2+x}$.

xY_xF_{2+x} кластеров в виде молекулярных ионов $\{(Y_nF_m)^{q(m-n)}\}$ на «разрыхление» кристаллической решетки иттрофлюорита, приводящее к структурному разупорядочению твердых растворов. В экспериментах по воздействию ионизирующего излучения и температурному отжигу показано, что в условиях равных доз γ -облучения радиационная стойкость кристаллов повышается со степенью их структурного разупорядочения. В системе CaF_2-YF_3 образуется неограниченный ряд твердых растворов гетеровалентного изоморфного замещения, представляющих смешанные кристаллы $Ca_{1-x}Y_xF_{2+x}$ с сохранением флюоритовой фазы до значений стехиометрического параметра $x=0,3$ [1]. С увеличением содержания в системе второго компонента YF_3 происходит разупорядочение кристаллической структуры, которое сопровождается изменениями в энергии кристаллической решетке основного компонента флюорита CaF_2 в результате образования общей решетки кристаллов иттрофлюорита. Расчеты энергий решеток по формуле Ферсмана показали, что при $p>0,3\%$ в системе $CaF_2 - pYF_3$ встраивание кристаллической решетки YF_3 в кристаллическую решетку CaF_2 приводит к качественным изменениям в решетке простых кристаллов флюорита в связи с началом влияния структурного разупорядочения и образования кристаллических твердых растворов с общей формулой $Ca_{1-x}Y_xF_{2+x}$, что хорошо согласуется с данными спектроскопических исследований кристаллов иттрофлюорита $Ca_{1-x}Y_xF_{2+x} \cdot Nd^{3+}$ [2], начиная с $x=0,003$. С увеличением содержания YF_3 образуются кластеры с общей формулой Y_nF_m при $m \gg n$, которые с учетом ионного характера взаимодействия Y^{3+} и F^- в решетке иттрофлюорита можно представить в виде молекулярных ионов $\{(Y_nF_m)^{q(m-n)}\}$ с общим отрицательным зарядом. С увеличением содержания второго компонента расстояние между соответствующими одноименно отрицательно заряженными молекулярными ионами $\{(Y_nF_m)^{q(m-n)}\}$ уменьшается и силы взаимодействия между ними, приводящие к взаимному кулоновскому отталкиванию увеличиваются, приводя к большему разрыхлению решетки и разупорядочению кристаллической структуры смешанного соединения и как следствие к понижению энергии решетки. Эксперименты по изучению воздействия γ -излучения показали, что в условиях равных доз и времен облучения радиационная стойкость кристаллов повышается в зависимости от степени их структурного разупорядочения.

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ (18-08-00132, 18-08-00291, 18-08-00192) и НИЦ «Курчатовский институт» (приказ №1919 от 14.08.2019).

Литература

1. Sobolev B., Fedorov P. Phase Diagrams of the $CaF_2-(Y, Ln)F_3$ Systems I. Experimental // Journal of the Less Common Metals. – 1978. – V. 60, No 1. – P. 33-46.
2. А. А. Каминский. “О законах разупорядочения кристаллического поля Ln^{3+} -ионов в диэлектрических кристаллах”, Докл. АН СССР, 300:4 (1988), 849–852

УДК 519.876.5

Генерация библиотек нейтронных ядерных данных для осуществления транспортных расчетов методами Монте-Карло

К.Г. Тимофеева¹, М.Ю. Сметанин², А.Н. Князев², В.П. Михайлов²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В рамках работы с помощью модулей RECONR и BROADR программного комплекса NJOY2012 осуществлено восстановление нейтронных поперечных сечений рассеяния на ядрах изотопов H^1 , H^2 , Li^6 , Li^7 , B^{10} , Fe^{56} , Fe^{58} , In^{113} , In^{115} с учетом доплеровского резонансного уширения при абсолютной температуре среды 300 К. Полученные значения переработаны модулем ACER в непрерывные по энергии поточечные представления («асе» - формат) для дальнейшего использования в транспортных расчетах кодом MCNP (Monte-Carlo N-Particle Transport Code) в целях решения задач моделирования поведения частиц в различных типах реакций. При проведении вычислений были использованы файлы оцененных ядерных величин из библиотек ENDF/B-VII.1 (США, 2011) и JENDL-4.0 (Япония, 2010) Национального центра ядерных данных.

В качестве примера приведены значения, полученные для изотопов Li^7 и Fe^{58} . На рис.1,2 представлены графики зависимостей от энергии налетающей частицы (МэВ) полного поперечного

сечения, а также поперечных сечений реакций поглощения, упругого рассеяния и гамма-излучения. Рис.3,4 иллюстрируют в трехмерном формате соответствующие угловые распределения.

При детальном сравнении значений, сгенерированных на основе оцененных ядерных величин из библиотеки ENDF/B-VII.1, с результатами, полученными при использовании библиотеки JENDL-4.0, можно увидеть явные расхождения. Следует учитывать, что некоторые файлы библиотеки JENDL-4.0 составлены с отклонениями от формата ENDF-6, что влияет на корректность их обработки стандартной версией программного комплекса NJOY. В подобных случаях требуется предварительная модификация определенных секций исходных данных перед дальнейшим использованием. Для решения задач, требующих высокой точности, величины должны быть тщательно проанализированы, отобраны и переработаны в соответствии с потребностью.

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ (20-08-00698, 20-08-00477, 19-08-00737) и НИЦ «Курчатовский институт» (приказ №1919 от 25.09.2020).

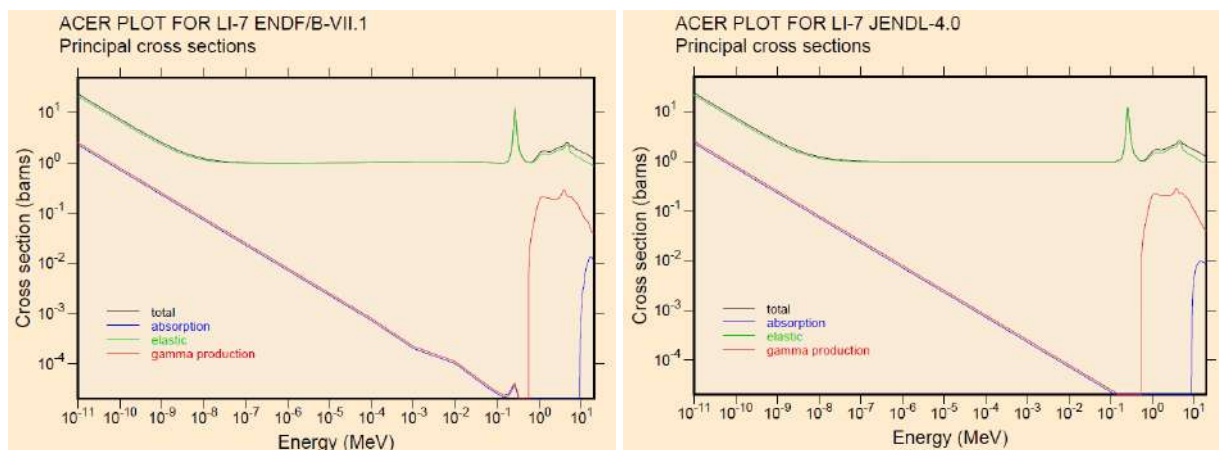


Рис.1. Зависимость значений нейтронных сечений рассеяния на ядре Li^7 от энергии, полученная на основе оцененных величин из библиотеки ENDF/B-VII.1 (слева) и JENDL-4.0 (справа)

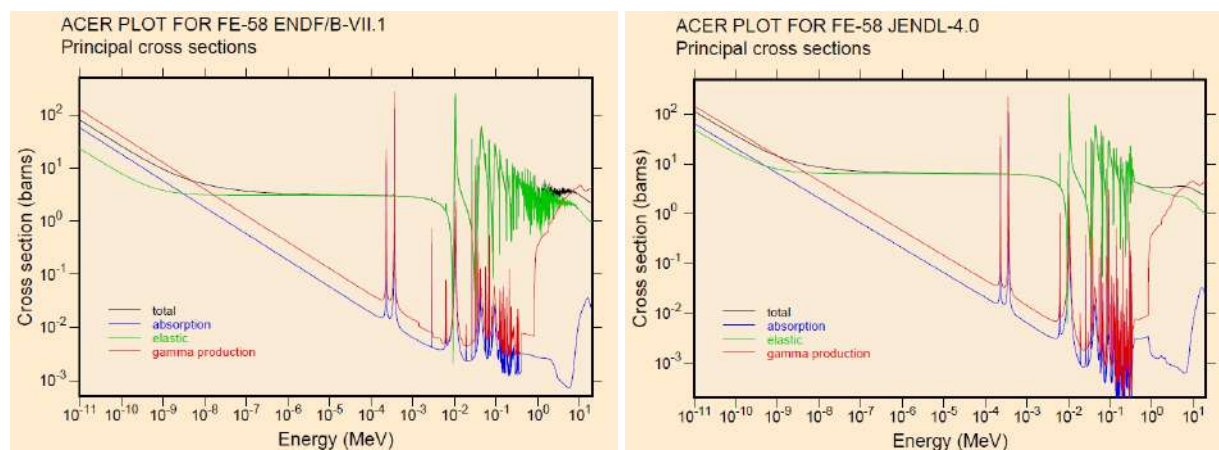


Рис.2. Зависимость значений нейтронных сечений рассеяния на ядре Fe^{58} от энергии, полученная на основе оцененных величин из библиотеки ENDF/B-VII.1 (слева) и JENDL-4.0 (справа)

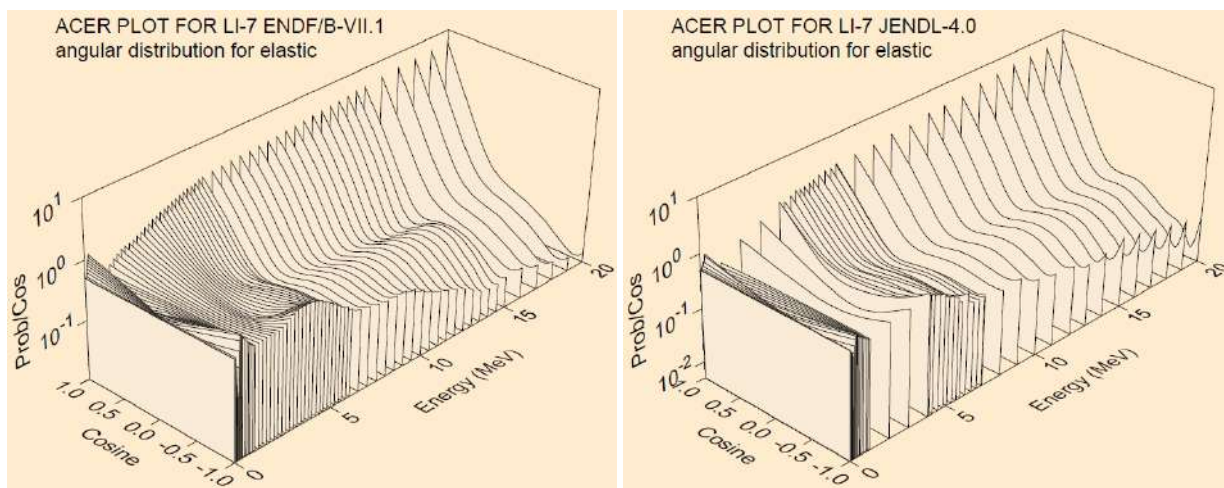


Рис.3. Угловое распределение для упругого рассеяния на ядре Li^7 , полученное на основе оцененных величин из библиотеки ENDF/B-VII.1 (слева) и JENDL-4.0 (справа)

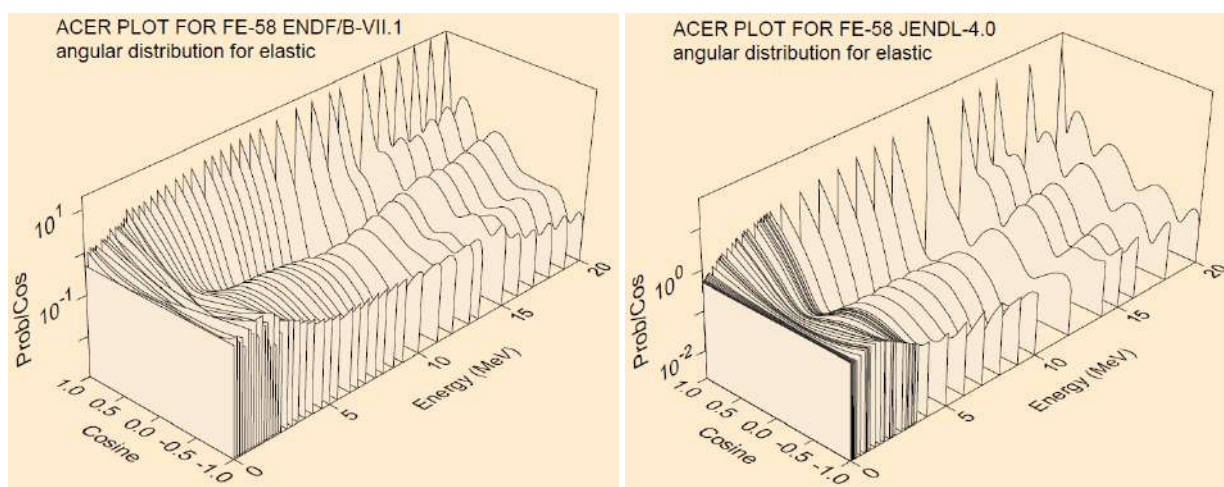


Рис.4. Угловое распределение для упругого рассеяния на ядре Fe^{58} , полученное на основе оцененных величин из библиотеки ENDF/B-VII.1 (слева) и JENDL-4.0 (справа)

Литература

1. R. E. MacFarlane, D. W. Muir, R. M. Boicourt and A. C. Kahler. The NJOY Nuclear data processing system, Version 2012.
2. A.Trkov, M. Herman and D. A. Brown. ENDF-6 Formats Manual.

УДК 519.876.5

Генерация проблемно-ориентированных систем ядерных данных для моделирования глубокого переноса излучений в сложных средах и композициях

К.Г. Тимофеева¹, И.Е. Квасов³, О.К. Шайхатаров²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

³ООО «Техноим»

В основе работы лежит восстановление сечений ядерных реакций путем обработки файлов формата ENDF с использованием программного обеспечения NJOY Nuclear Data Processing System. Работа комплекса заключается в последовательном запуске следующего ряда модулей: MODER, RECONR, BROADR, UNRESR, ACER, PLOTR и VIEWR.

MODER носит утилитарный характер и необходим для конвертации ENDF-, PENDF- и GENDF-лент в бинарный вид и обратно в ASCII формат. Непосредственно генерация сечений начинается с запуска модуля RECONR и происходит в несколько этапов. На вход программе подается исходный ENDF-файл, предварительно преобразованный модулем MODER в бинарный вид, а также номер обрабатываемого материала и желаемый уровень точности. Методом обратного стека производится построение единой для всех сечений энергетической сетки. Необходимо, чтобы она являлась линейной, так как использование неравномерных сеток приводит к погрешностям в дальнейших транспортных расчетах. Затем осуществляется восстановление резонансов и сечений с помощью нелинейных схем интерполяции на основе одного из следующих представлений: Single-Level Breit-Wigner (SLBW), Multilevel Breit-Wigner (MLBW), Adler-Adler (AA), Hybrid R-Function (HRF), Reich-Moore (RM), Reich-Moore-Limited (RML). В низко- и высокоэнергетических диапазонах данные о сечениях реакций содержатся в явном виде.

Далее с помощью модуля BROADR полученные значения проходят корректировку с учетом доплеровского уширения. Оценка сечений производится с заданной точностью разложением в ряд Тейлора после ограничения области интегрирования. На вход передается уровень допустимой ошибки в методе обратного стека и при уширении, а также начальная и конечная температура. Проводить расчеты можно итерационно, повышая тем самым точность полученных величин.

На последнем этапе в модуле UNRESR происходит восстановление средних значений сечений неразрешенных резонансов из условия сохранения скорости реакции. В дополнение к величинам, используемым в предыдущих итерациях, на данном шаге вводится параметр, определяющий глубину резонансных провалов. На этом процесс восстановления сечений завершается. Далее с помощью модуля ACER следует запись данных в библиотеки формата ACE, которые требуются для программы MCNP, использующейся при решении транспортных задач. В графическом модуле PLOTTR происходит форматирование полученных значений для последующей их визуализации в модуле VIEWR.

Главной целью работы являлось сравнение рассчитанных на данных различных входных библиотек характеристик ослабления потока нейтронов и гамма-излучения для решения задач противорадиационной защиты. Было проведено восстановление сечений нейтронных реакций на ядрах H^1 , B^{10} , C^{12} , N^{14} , O^{16} , Al^{27} , Fe^{56} на основе шести библиотек. Результаты исследования показали, что у изотопов с небольшим числом каналов распада (небольшим атомным номером) расхождение полученных величин не превосходит 10%. Однако у изотопов с большим порядковым номером значения могут отличаться в несколько раз. В качестве примера на рис.1 приведены полученные результаты для H^1 и Fe^{56} .

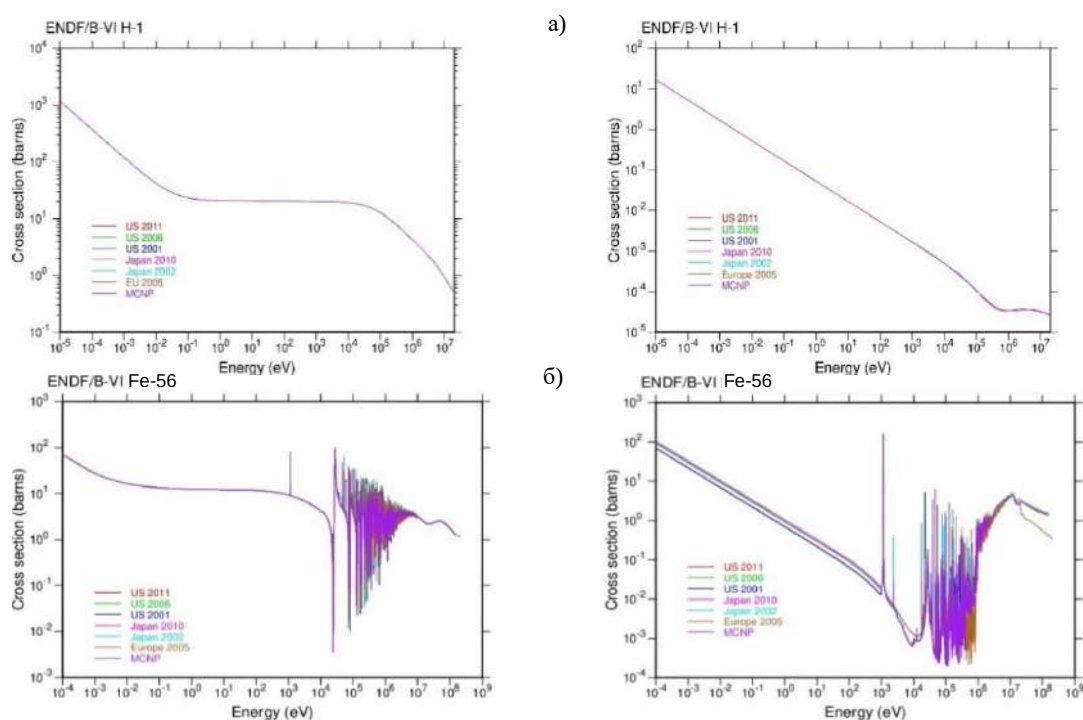


Рис.3. Сравнение сгенерированных библиотек и штатной библиотеки MCNP для а) изотопа водорода H^1 и б) изотопа железа Fe^{56} . Слева направо: полное сечение; сечение образования гамма-квантов.

Моделирование потока элементарных частиц в реакторе методом Монте-Карло показало, что подобные различия приводят к изменению дозы облучения на 0.2-20% в зависимости от точки, в которой производится измерение. Наибольшее отклонение достигается при измерении дозы облучения за железобетонной защитой, однако там же данный результат обладает наибольшей ошибкой, а все полученные числа совпадают с учетом погрешностей.

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ (18-08-00438, 18-08-00495) и НИЦ «Курчатовский институт» (приказ №1919 от 25.09.2020).

Литература

1. R. E. MacFarlane, D. W. Muir, R. M. Boicourt and A. C. Kahler. The NJOY Nuclear data processing system, Version 2012.
2. A. Trkov, M. Herman and D. A. Brown. ENDF-6 Formats Manual.
3. Bertulani C.A. Nuclear Reactions, arXiv:0908.3275v2 [nucl-th] (2010).
4. Ridley B.W. and Turner J.F. Nucl. Phys.58, 497 (1964).

УДК 519.876.5

Исследование максимумов разделения смеси газов в зависимости от их концентраций

А.И. Пасевьева¹, Г.С. Колядко², А.В. Нахапетян³, Д.А. Бабайлов³, М.Б. Федорова³

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² АНО «ЦПКТ»,

³ ООО «ЛОКиП»

В начальный момент времени смесь газов с различными молекулярными массами и одинаковыми концентрациями находится в одном из двух сосудов, разделенных тонкой трубкой с краном S. Во втором сосуде давление стремится к нулю.

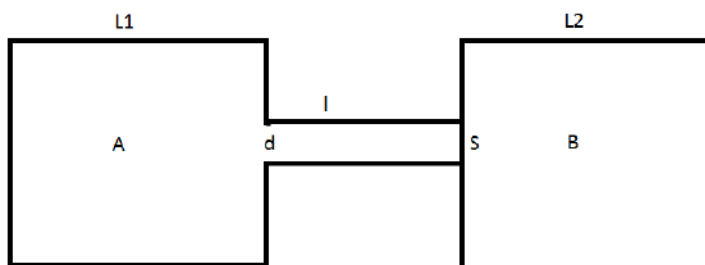


Рис.1. Схема установки

После открытия крана S легкий газ проникает в вакуумный сосуд быстрее тяжелого. Происходит разделение газов. Тонкая трубка между сосудами становится фильтром, что является важным практическим применением задачи. В некоторый момент времени t разделение смеси достигает максимума, кран S можно закрыть. Но этот максимум не всегда достаточно широкий, чтобы успеть отловить его (рис. 2).

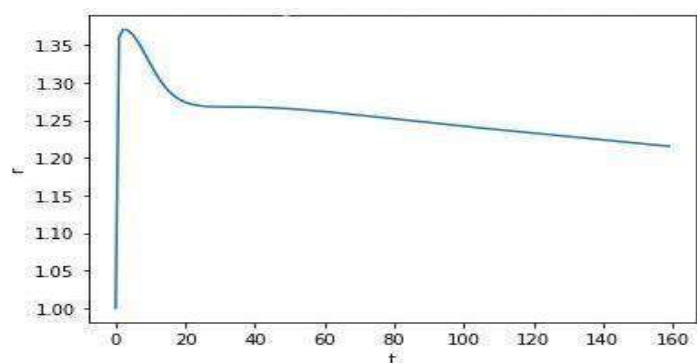


Рис.2. Разделение смеси газов при отношении масс $z=2$, начальными концентрациями газов $n=1$

Было замечено, что при увеличении начальных концентраций газов в сосуде А максимум разделения сдвигается и расширяется во времени (рис. 2 и рис. 3), благодаря чему можно отфильтровать большее количество газа и закрыть кран близко к максимуму разделения.

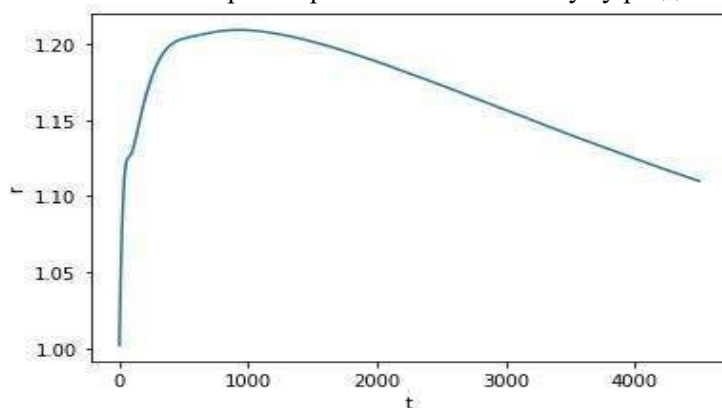


Рис. 3 Разделение смеси газов при отношении масс $z=2$, начальными концентрациями газов $n=2$

На рис. 2 и рис. 3 $r(t)$ - отношение суммарных концентраций компонент смеси в сосуде, в котором в момент времени $t=0$ давление низкое.

Для поставленной задачи была разработана проблемно-моделирующая среда, использующая проекционный метод вычисления интеграла столкновений [5] и TVD-схемы для левой части кинетического уравнения Больцмана. Получены графики зависимостей разделения компонент смеси от времени, а также графики потоков компонент и плотностей концентраций в сосудах. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 20-07-00135, 19-08-00137, 19-08-00181, 18-07-00700) и НИЦ «Курчатовский институт» (приказ №1919 от 25.09.2020).

Литература

1. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. - М.: Наука. 1967. - 440 с.
2. Аникин Ю.А., Клосс Ю.Ю., Rogozin O.A., Сазыкина Т.А., Черемисин Ф.Г. Введение в численные методы в динамике разреженного газа. - М.: МФТИ, 2011 - 80 с.
3. Nobuya Miyoshi, et al. Development of Ultra Small Shock Tube for High Energy Molecular Beam Source. In: 26th Int. Symposium on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conference Proceedings 1084, 2009, p.557-562.
4. Mirshecari G., Brouillette M. Experimental study of the shock propagation in micro-scale channel // Book of proceedings of 27-th International Symposium on Shock Waves. P.260. St. Petersburg, Russia, 2009
5. Черемисин Ф. Г. Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2006. — Т. 46, № 2. — С. 329–343.

УДК 519.876.5

Исследование неравновесного течения в много-трубном микронасосе Кнудсена путем численного решения кинетического уравнения Больцмана проекционным методом

О.И. Додулад^{1,2}, В.Г. Гришина², Ю.В. Широковская², П.В. Шувалов²

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Уравнение Больцмана описывает эволюцию функции распределения идеального газа при низких концентрациях. Применяется переход к безразмерным переменным для численных расчетов [1].

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \int_{\mathbf{R}^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{b_{\max}} (f' f'_1 - f f_1) g b db d\varepsilon d^3 \xi_1$$

Интеграл столкновений в правой части считается для потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса

$$U(r) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right),$$

где параметры σ и ε определяются экспериментально и приведены, например, в [2]. Метод вычисления интеграла столкновений для простого газа основан на вычислении проекции интеграла столкновений на скоростную сетку I_γ и использует кубатурные сетки Коробова [3,4].

$$I(\xi) = \sum_{\gamma} I_{\gamma} \delta(\xi - \xi_{\gamma})$$

Разбиение модели на неструктурированную сетку производится с помощью программы GMSH.

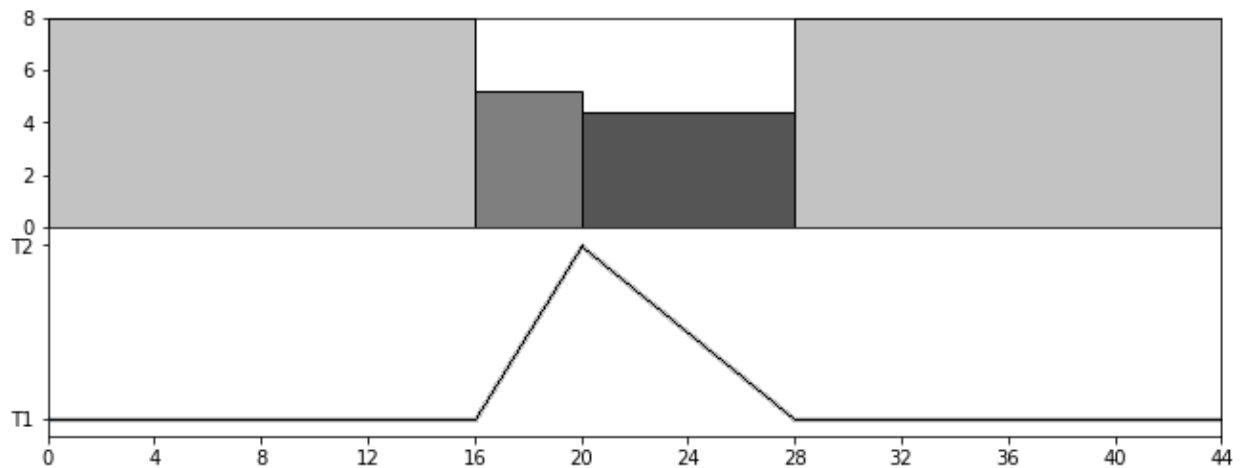


Рис. 1. Схема установки (верхняя половина, вид сбоку) и температура стенок

График температуры стенок представлен на рис. 1. Отношение T_2/T_1 определяет величину температурного градиента. Моделируется периодическая система из микронасосов, но зеркальные граничные условия позволяют свести задачу к моделированию четверти одного микронасоса.

Для оценки эффективности насоса вычисляется откачка, равная отношению средних давлений в резервуарах. На рис. 2 представлены данные для установившейся откачки для моделей потенциалов Леннарда-Джонса и твердых сфер. На рис. 3 приведена зависимость максимальной откачки от отношения температур.

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ (20-08-00482, 19-08-00510, 18-08-00107, 18-07-00323) и НИЦ «Курчатовский институт» (приказ №1808 от 14.08.2019).

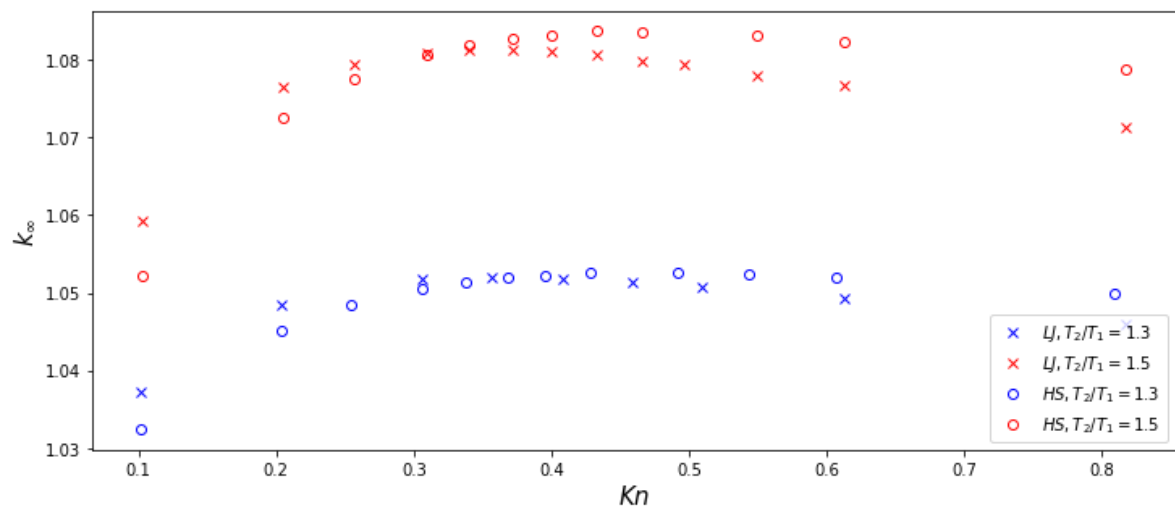


Рис.2. Установившаяся откачка в зависимости от числа Кнудсена.

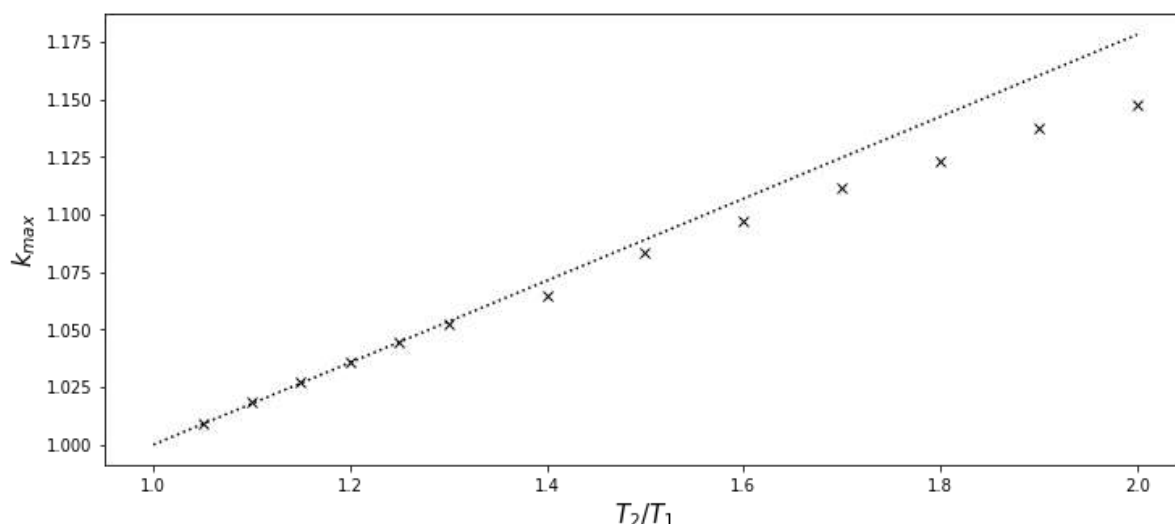


Рис. 3. Максимальная откачка в зависимости от T_2/T_1 .

Литература

1. Коган М. Н. Динамика разреженного газа (кинетическая теория). – М.: Наука, 1967. с. 89
2. Дж. Гирифельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей. – М.: Издательство иностранной литературы, 1961г.
3. Черемисин Ф. Г. Введение в консервативный проекционный метод вычисления интеграла столкновений и метод решения уравнения Больцмана – М.: МФТИ, 2015.
4. Додулад О. И. Разработка многоточечных проекционных методов вычисления интеграла столкновений Больцмана и их алгоритмической и программной реализации – М.: МФТИ, 2015.

УДК 519.876.5

Исследование производства ^{99}Mo с помощью фотонейтронной реакции методом расчета Монте-Карло

Али Торкамани¹, Фаршад Гасеми²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физическая исследовательская школа и ускоритель частиц,
Научно-исследовательский институт ядерной науки и технологий (НСТРИ)

Радиофармацевтические препараты являются основными и необходимыми компонентами в медицине, которые выпускаются в соответствующих формах для использования в диагностике злокачественных заболеваний. Технеций-99м ($^{99\text{m}}\text{Tc}$, $T_{1/2}=6\text{ч}$) является наиболее широко используемым радионуклидом в диагностической визуализации в ядерной медицине, он получается из своего материнского нуклида молибдена-99 (^{99}Mo , $T_{1/2}=66\text{ч}$), который может быть получен несколькими различными способами. Одним из рассмотренных здесь методов является использование реакции (γ, n) на мишени ^{100}Mo . На рис. 1 показана схема распада ^{99}Mo [1]. Энергия фотона 140 кэВ идеально подходит для эффективного обнаружения сцинтилляционными приборами, такими как гамма-камеры. Данные, собранные камерой, анализируются для получения детальных структурных и функциональных изображений [2].

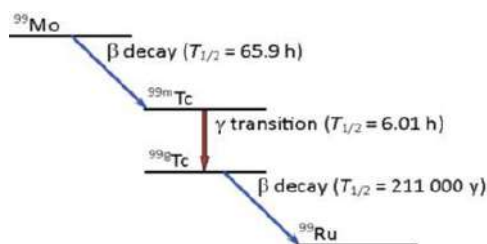


Рис. 1. Упрощенная схема распада ^{99}Mo и $^{99\text{m}}\text{Tc}$ [1].

Что касается недавних исследований о производстве ^{99}Mo с использованием ускорителя электронов, то оказываются доступны два способа. Первый предполагает использование ускорителя с высокой мощностью, а также высокой энергией пучка, для осуществления реакции $^{100}\text{Mo}(\gamma, n)^{99}\text{Mo}$ (фотонейтрон). Второй способ заключается в применении ускорителя электронов высокой мощности (например, линейного ускорителя или Родотрон) с целью получения соответствующего потока нейтронов для участия в реакции $^{98}\text{Mo}(n, \gamma)^{99}\text{Mo}$ (захват нейтронов). При энергии около 14 МэВ имеется максимальное сечение захвата нейтронов при образовании ^{99}Mo в реакции (γ, n) (Рис. 2), поэтому, рассматривая спектр тормозного излучения, желательно получить пучок с энергией от 30 до 45 МэВ.

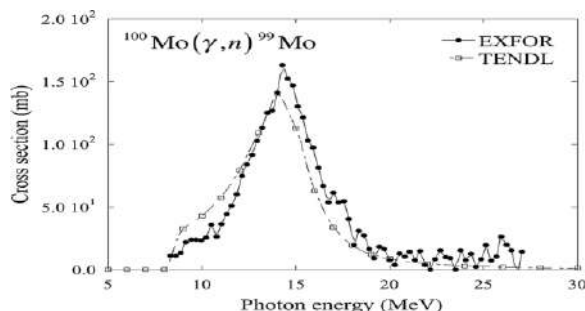


Рис. 2. Экспериментальные сечения EXFOR и TENDL для $^{100}\text{Mo}(\gamma, n)^{99}\text{Mo}$ [3].

При этом методе пластины ^{100}Mo используются в качестве электронно-фотонного преобразователя, а также первичной производственной мишени (однотактный подход). 9 полосковых плат ^{100}Mo размером $10 \times 3 \times 0.2 \text{ см}^3$ облучают непрерывным электронным пучком (30 МэВ-1 мА). Для сравнения и проверки значений некоторых частей расчетов полученные результаты по ссылке [4] были пересчитаны с помощью наших методов, которые показывают хорошее совпадение (Рис. 3). Разница между двумя диаграммами обусловлена разницей в количестве энергии электронного пучка (3 МэВ).

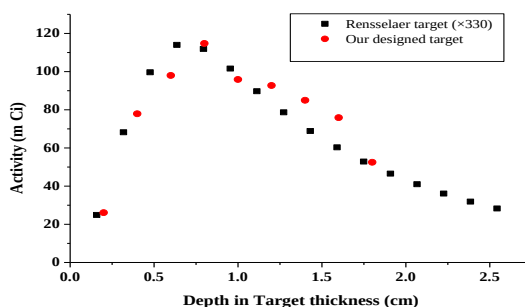


Рис. 3. Активность на глубине двух расчетных мишеней по толщине.

Из Рис. 4 видно, что при насыщенном состоянии суммарная активность всех пластинок равна примерно 265 Ки, что достигается после 14 суток (времени, равного пяти периодам полураспада ^{99}Mo) непрерывного облучения мишени. Время облучения зависит от возможностей объекта. В коммерческом масштабе производства благодаря ежедневной программе распределения 24-часовое облучение является обычным периодом. Принимая во внимание 24-часовое облучение, активность 61 Ки будет достижима от всех пластин в Конце бомбардировки. Также иногда рассматривается и 48-часовое облучение, которое приведет к суммарной активности 108.5 Ки (Рис. 4). Наиболее активированная область расположена на глубине около 0.8 см от первой из ^{100}Mo -мишеней.

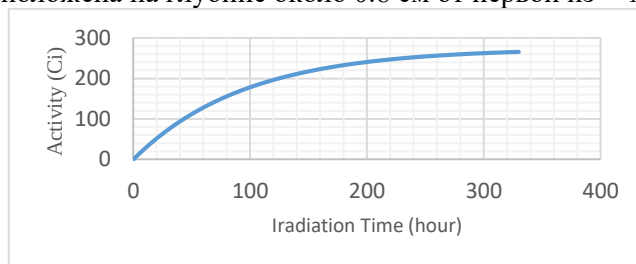


Рис. 4: Общая активность ^{99}Mo пластин ^{100}Mo в течение времени облучения (для электронного пучка 30 МэВ с напряжением 1 мА).

Для повышения выхода продукции молибдена-99 (^{99}Mo) в качестве нового метода предложено проектирование гибридной мишени. Целью является создание гибридной мишени для производства ^{99}Mo одновременно с помощью реакций $^{100}\text{Mo}(\gamma, n)^{99}\text{Mo}$ (фотонейтрон) и $^{98}\text{Mo}(n, \gamma)^{99}\text{Mo}$ (захват нейтронов).

Литература:

1. Технические доклады серии 478, Международное агентство по атомной энергии, 2015.
2. Производство медицинских изотопов без высокообогащенного урана, National Academies Press, 2009.
3. Т. Майкл Мартин и др. Получение $^{99}\text{Mo}/^{99m}\text{Tc}$ с помощью фотонейтронной реакции с использованием природного молибдена и обогащенного ^{100}Mo . Журнал радиоаналитической и ядерной химии. 2017.
4. Й. Данон, Р. Блок, Дж. Харви. Производство Мо-99 с использованием электронов 30 МэВ и мишени Мо-100. 2010. Т. 103. С. 1081–1082.

УДК 519.876.5

Исследования зависимости спектрально-люминесцентных свойств TR^{3+} -ионов от микроструктуры кристаллических твердых растворов и степени их разупорядочения

С.Э. Саркисов¹, В.А. Юсим¹, М.В. Калинин¹, А.С. Самонов¹

¹НИЦ «Курчатовский институт»

На примере гетеровалентных $\text{CaF}_2\text{-YF}_3$ и изовалентных $\text{CaF}_2\text{-SrF}_2$ бинарных систем твердых растворов, активированных ионами Nd^{3+} показана связь микроструктурных изменений в кристаллической решетке и влияние кулоновских взаимодействий ионов с одноименными и противоположенными зарядами в объеме элементарных ячеек, на формирование квазицентров в оптических спектрах ионов активатора. При введении в кристаллическую матрицу примесных ионов образуются активаторные центры (АЦ) [1]. Радиус АЦ соответствует линейным размерам элементарной ячейки. Полученные зависимости изменения объема элементарной ячейки в кристаллической решетке твердых растворов с гетеровалентным замещением $\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{F}_{2+x}$ и изовалентным замещением $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{F}_{2+x}$ во всем интервале изменения параметра x от 0 до 1, показали, что с увеличением содержания примесных компонентов YF_3 и SrF_2 в твердых растворах объемы элементарной ячейки и постоянная решетки линейно возрастают по закону Вегарда. В многокомпонентных фторидных системах с гетеровалентным изоморфизмом, например, иттрио-флюорита $\text{CaF}_2\text{-YF}_3\text{:TR}^{3+}(\text{Nd}^{3+})$ характер образования $[\text{TR}^{3+}\text{-F}^-]$ -центров при содержании YF_3 более 0,2 мол.% приводит к сложным координационным полиэдрам [2]. С увеличением концентрации TR^{3+} -ионов в кристаллах твердых растворов щелочноземельных фторидов MeF_2 с трифторидами редкоземельных элементов TRF_3 и иттрия YF_3 с избыточным содержанием анионов F^- начинают образовываться кластеры $\{\text{TR}_n\text{F}_m\}$ [3], которые захватывают в свой состав избыток анионов. С увеличением концентрации активаторных ионов между ними возникает взаимодействия, которые проявляются в уширении спектральных линий, процессах миграции энергии электронного возбуждения и других влияниях на излучательные характеристики активной среды. В результате вхождения ионов активной примеси TR^{3+} в родительские кластеры $\{\text{Ca}_6\text{F}_{32}\}$ и $\{\text{Y}_6\text{F}_{37}\}$ [3] происходит частичное замещение ионов Ca^{2+} и Y^{3+} при этом короткие межионные расстояния способствуют возникновению влияния всевозможных зарядовых комбинаций вокруг АЦ. В этом случае, значительную составляющую в искажение симметрии лигандного окружения, формирующего кристаллическое поле АЦ и приводящее к неоднородному уширению спектральных линий, будет дополнительно вносить кулоновское взаимодействие между соседними близкорасположенными ионами с одинаковыми и противоположными зарядами.

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ (20-08-00278, 18-07-00410, 19-29-02007, 18-08-00697) и НИЦ «Курчатовский институт» (приказ №1919 от 14.08.2019).

Литература

5. А.А. Каминский, С.Э. Саркисов. «Физика и спектроскопия лазерных кристаллов / М., Наука, 1986, с.282
6. А.А. Каминский. “О законах разупорядочения кристаллического поля Ln^{3+} -ионов в диэлектрических кристаллах”, Докл. АН СССР, **300**:4 (1988), 849–852
7. The Rare Earth Trifluorides. Part 1. The High Temperature Chemistry of the Rare Earth Trifluorides. / Sobolev B. P. – Barcelona: Institut d’Estudis Catalans, 2000.

Компьютерные модели течения газа через коллиматор на основе кинетической теории

Е. Комаров¹, Ю.Ю. Клосс^{1,2}, Т.А. Сазыкина², И.В. Говорун²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

³ФИЦ «Информатики и Управления» РАН

Целью данной работы было сравнение разных видов простых коллиматоров, и исследование влияния их геометрической формы на форму образующегося молекулярного пучка.

Для сравнения были выбраны два вида коллиматоров. Первый тип коллиматоров не имеет ограничений по длине, а второй – имеет.

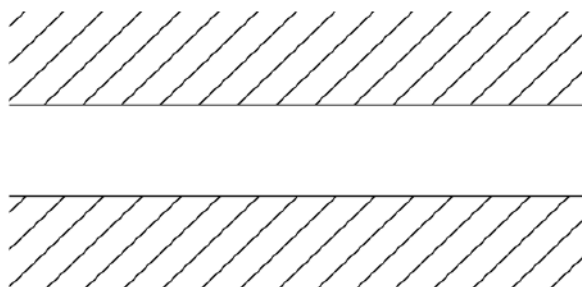


Рис. 1. Плоский коллиматор

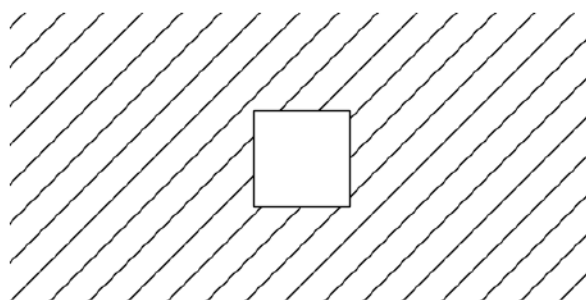


Рис. 2. Прямоугольный коллиматор

Сравнение проводилось на примере газа, который истекает из прямоугольного резервуара в вакуум. Исследовалось, как меняется распределение плотности, давления и температуры на оси симметрии системы в зависимости от типа отверстия и его геометрических размеров.

Моделирование производилось с помощью численного решения уравнения Больцмана [1] консервативными методами [2, 3] с помощью разностной схемы типа TVD [4]. Для учёта взаимодействия компонент с разными скоростями использовался модуль для вычисления интеграла столкновений двухточечным методом [5, 6].

Для решения УБ было разработано консольное приложение. Это приложение позволяет указывать произвольные начальные и граничные условия, и моделировать развитие любой системы, подчиняющейся УБ.

Для исследуемой задачи были заданы конкретные граничные и начальные условия. Начальные условия – однородно распределенный газ в области внутри резервуара и вакуум во всей остальной области счета. Диффузное г.у. – на стенках резервуара, нулевое – на остальных границах.

Для ускорения и повышения максимальной точности вычислений использовалась технология Nvidia CUDA [7]. С помощью этой технологии математические вычисления можно производить с помощью видеокарты, в которой есть сотни маломощных процессоров. Это позволяет существенно ускорить задачи с высокой степенью параллельности. Решение локальных дифференциальных уравнений, безусловно, относится к этой категории задач.

Моделирование эволюции функции распределения позволило проследить эволюцию макроскопических величин – концентрации, давления, температуры. На рис. 1 и рис. 2 изображены распределения эти в срезе на оси симметрии системы для обеих конфигураций.

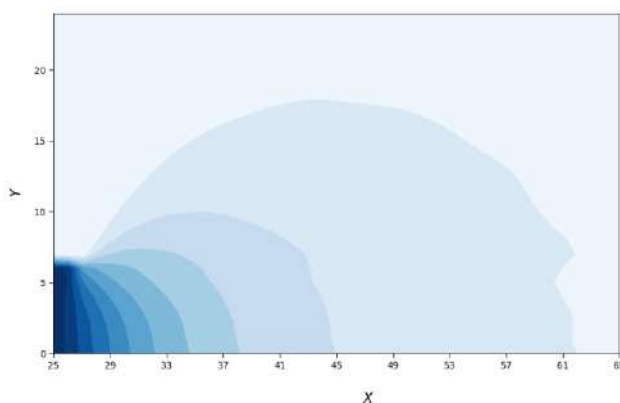


Рис. 1. Поля плотности для плоского коллиматора

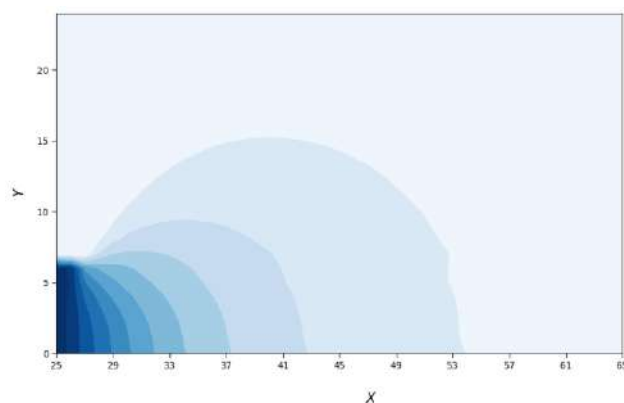


Рис. 2. Поля плотности для прямоугольного коллиматора

Полученные результаты свидетельствуют о том, что ограничение на продольный размер отверстия оказывает на ширину пучка очень маленькое влияние – изменение ширины от 0,7-1,8%, и поперечные размеры отверстия влияют на эту ширину гораздо сильнее. Это позволяет упростить геометрию задачи до двумерной без существенной утраты точности, и упростить вычисления и анализ в задачах с большим количеством компонент (газов, резервуаров, отверстий, и т.д.)

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 20-08-00634, 18-08-00523) и НИЦ Курчатовский институт (приказ №1919 от 25.09.2020 г.).

Литература

1. Коган, М. Н., Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967. — 440 с.
2. Ф.Г., Черемисин. Численное решение кинетического уравнения Больцмана для одномерных стационарных движений газа. ЖВМ и МФ. 1970, Т. 10, 3, стр. 654-665.
3. Аристов, В. В., Черемисин, Ф. Г. Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана [Текст] // Докл. АН СССР. — 1976. — Т. 231, № 1. — С. 49–52. (про разделение на интеграл и УБ)
4. Самарский, А. А., Вабищевич, П. Н. Аддитивные схемы для задач математической физики [Текст] — М.: Наука, 2001. — 319 с.
5. Черемисин, Ф.Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана. Доклады РАН. 1997, Т. 357, 1, стр. 53-56.
6. Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Черемисин Ф.Г., Рябченков В.В. Система программных модулей для вычисления интеграла столкновений Больцмана // Вычислительные методы и программирование. — 2011. — Т. 12. — С. 40-47.
7. Suchard M.A., Wang Q., Chan C., Frelinger J., Cron A., West M., Understanding GPU Programming for Statistical Computation: Studies in Massively Parallel Massive Mixtures. — Journal of Computational & Graphical Statistics (JCGS), V. 19, P. 419-438, 2010.

УДК 519.876.5

Моделирование двумерного истечения двухкомпонентной газовой смеси в вакуум через тонкую щель в широком диапазоне значений числа Кнудсена

С.С. Ситников^{1,3}, Ф.Г. Черемисин^{1,2}, Ю.Ю. Клосс^{1,3}, Л.А. Сазыкина³

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² НИЦ «Информатики и управления» (Вычислительный Центр РАН им А.А. Дородницына)

³ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Задача истечения реальных газов в вакуум имеет множество приложений в микрогидродинамике, физике низких давлений, электронной микроскопии и других областях науки и техники [1-4]. Отдельный интерес представляет рассмотрение её двумерного случая, в котором за счёт уменьшения размерности пространства, удаётся получить более высокую точность численного моделирования. В настоящей работе рассматривался частный случай данной задачи, а именно двумерное целевое истечение двухкомпонентной газовой смеси в вакуум.

Для моделирования течения реальных газов, как правило, используются метод прямого статистического моделирования или различные подходы, основанные на решении модельных уравнений. Эти методы имеют известные границы применимости. Их использование также накладывает существенные ограничения на точность моделирования. В данной работе численное моделирование осуществлялось путём прямого решения кинетического уравнения Больцмана [5]. Это позволило получить более высокую точность результатов, детально рассмотреть и проанализировать распределения концентрации и температуры в стационарном режиме истечения, а также провести исследование процесса установления течения.

Схема постановки задачи приведена на рис. 1.

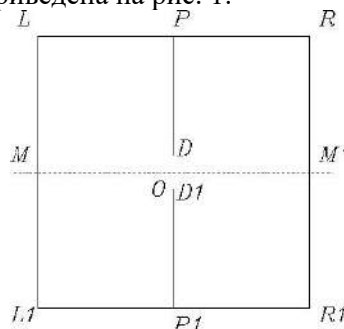


Рис. 1. Постановка задачи.

В левой части области счёта (LRR_1L_1) находится заполненный двухкомпонентной газовой смесью сосуд (LPP_1L_1), в правой – вакуум (PRR_1P_1). Сосуд и вакуум разделены непроницаемой тонкой стенкой PP_1 , в которой имеется малое отверстие DD_1 . Задача двумерная. За счёт симметрии (MM' – ось симметрии) счёт ведётся только в верхней полуплоскости $MLRM'$. На оси симметрии MM' ставятся зеркальные условия. На стенках PD , LP , LM – диффузные граничные условия, PR и RM' – условие отсутствия втекающего внутрь области газа. В начальный момент в сосуде находится двухкомпонентная смесь $Ag-Ne$ с заданными температурой и концентрацией и максвелловским распределением молекул по скоростям. В области вакуума также максвелловское распределение с теми же параметрами, что и в сосуде, но пренебрежимо малой концентрацией. Начальная температура газовой смеси $T = 273K$. Численное решение осуществляется на прямоугольной сетке с использованием явной дивергентной разностной схемы первого порядка точности на дискретных значениях импульсов. Шаг пространственной сетки меняется в зависимости от расстояния до щели (см. рис. 2).

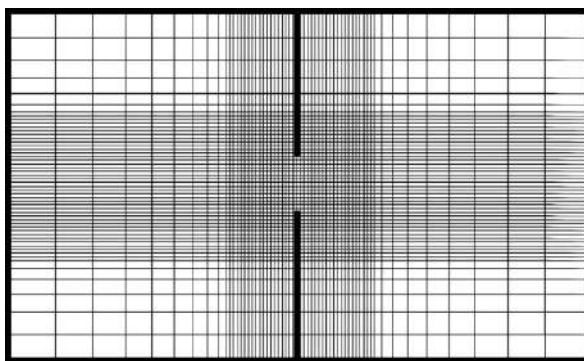


Рис. 2. Иллюстрация изменения шага пространственной сетки.

Моделирование процесса истечения производилось путём прямого решения кинетического уравнения Больцмана. Для этого применялся метод расщепления по физическим процессам [6]. При решении уравнения адвекции использовался метод расщепления по пространственным направлениям [7]. При решении задачи релаксации вычисление интеграла столкновений осуществлялось проекционно-интерполяционным методом [8]. Данный метод является консервативным и обеспечивает точное равенство нулю интеграла столкновений от максвелловской функции распределения. В качестве потенциала взаимодействия молекул был взят потенциал Леннарда-Джонса. Окончательное вычисление интеграла производилось при помощи сеток Коробова.

Моделирование производилось в диапазоне значений числа Кнудсена от 0.1 до 10. Таким образом, был исследован практически весь диапазон от гидродинамического предела до свободно-молекулярного режима течения. Шаг по пространству в области с постоянным мелким шагом составлял 0.2 длины свободного пробега, шаг по импульсной сетке – 0.2 безразмерных импульса, по

времени – 0.008 времени свободного пробега, радиус импульсной сетки – 5.3 безразмерных импульса. Размеры области счёта выбирались достаточно большими для того, чтобы конечные размеры сосуда не могли повлиять на результаты моделирования на интервале времени исследования. Были получены распределения ключевых физических величин на оси симметрии, а также поля концентрации и температуры компонент смеси в стационарном режиме истечения. Отдельно исследовался процесс установления течения. Исследование нестационарного процесса заключалось в получении временной зависимости выходного потока компонент смеси и анализе распределений концентрации и температуры вблизи щели в различные моменты времени. Также был рассмотрен случай, когда размеры сосуда соизмеримы с длиной щели. Интерес представляет распределение отношения температур компонент смеси для этого случая (при равных начальных концентрациях и температурах компонент). Соответствующее распределение приведено на рис. 3 (размеры по осям – в длинах свободного пробега). Видно, что в области сосуда возникают характерные зоны, где соответствующее отношение значительно меньше или же, наоборот, превышает единицу. Зоны, в которых температура соответствующей компоненты ниже, видимо, соответствуют областям более упорядоченного движения молекул этой компоненты.

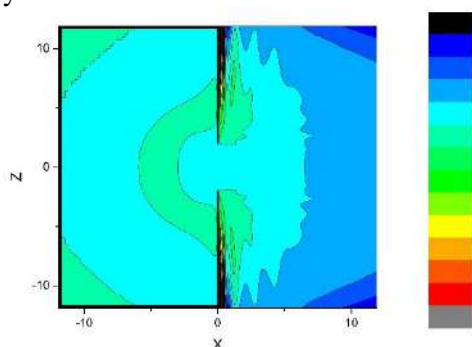


Рис. 3. Отношение температур лёгкой компоненты и тяжёлой.

В дальнейшем планируется более детально рассмотреть случай, когда размеры сосуда соизмеримы с длиной щели, а также провести исследование для других отношений начальных концентраций и температур компонент газовой смеси.

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ (18-07-00712, 19-29-02018, 19-08-00216) и НИЦ «Курчатовский институт» (приказ №1808 от 14.08.2019).

Литература

1. Danilatos G.D. Direct simulation Monte Carlo study of orifice flow // *Rarefied Gas Dynamics*. 2001. P. 924–932.
2. Jamison A.J., Ketsdever A.D., Muntz E.P. Gas dynamic calibration of a nano-Newton thrust stand // *Rev. Sci. Instrum.* 2002. V. 73. P. 3629-3637.
3. Sazhin O. Rarefied gas flow through a channel of finite length into a vacuum // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2009. V. 109, № 4. P. 700-706. DOI: 10.1134/s1063776109100161
4. Wang M.R., Li Z.X. Numerical simulations on performance of MEMS-based nozzles at moderate or low temperatures. // *Microfluidics and Nanofluidics*. 2004. V. 1, №1. P. 62-70. DOI: 10.1007/s10404-004-0008-5.
5. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
6. Аристов В.В., Черемисин Ф.Г. Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана // *Докл. АН СССР*. 1976 Т. 231, № 1. С. 49–52.
7. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Аддитивные схемы для задач математической физики. М.: Наука, 2001. 319 с.
8. 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 // *Ж. вычисл. матем. и матем. физики*. 2016. Т. 56, № 6. С. 89-105. DOI: 10.7868/S0044466916060119.

Моделирование переноса в гетерогенной композиции материалов мгновенных нейтронов и гамма-излучения из активной зоны ядерного реактора

М.В. Дорошенко^{1,2}, И.В. Чешигин^{1,2}, Е.И. Уксусов^{1,2}, П.А. Татауров², Д.О. Михайлов^{2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²НИЦ "Курчатовский институт"

³ООО «Техноим»

Анализ многомерных контрольных экспериментов на установке ОР-М НИЦ КИ для изучения характеристик переноса нейтронов и гамма-квантов в радиационно-защитных материалах, расположенных вблизи реактора, является актуальной и востребованной практикой задачей.

Вычислительное моделирование пространственных и энергетических характеристик поля излучения в трехмерном неоднородном составе плоских слоев материалов (вода, алюминий, карбид бора и сталь) проводилось с использованием программного комплекса MCNP. Топливные элементы в активной зоне отображались в виде линейных источников с равномерным распределением по длине точечных изотропных источников нейтронов и гамма-излучения из спектра деления ^{235}U . Рассматривались следующие диапазоны энергий: нейтроны - от теплового пика до 15 МэВ, гамма-кванты от 0,1 до 10 МэВ.

Рассчитаны пространственные и энергетические распределения нейтронов и вторичного гамма-излучения за различными слоями в составе. Из рисунка видно, что в спектрах вторичного гамма-излучения выделяются линии от неупругого рассеяния быстрых нейтронов и радиационного захвата тепловых нейтронов ядрами.

Результаты компьютерного моделирования представлены в графической форме.

Некоторые рассчитанные функционалы переноса нейтронов сравниваются с экспериментальными данными. В пределах погрешностей наблюдалось совпадение приведенных распределений нейтронных потоков во всем диапазоне их энергий.

Так же было проведено вычисление экспозиционной дозы для гамма-квантов и эквивалентной дозы для всех частиц присутствующих в задаче.

Эквивалентная доза фотонов (Зв/ч)	Бак Реактора	B4C	ЖВЗ
0	138.36±33.63	40.51±18.20	2.70±3.86
20 горизонталь	75.72±24.71	27.14±14.85	1.99±3.32
40 горизонталь	24.14±14.24	10.49±9.28	0.90±2.29

Наконец, было выполнено сравнение между различными библиотеками констант и получено понимание о размере их вклада в текущую задачу.

Исследования проводились при финансовой поддержке Российского фонда федерального имущества (проект № 19-08-00386, 20-08-00211) и НИЦ «Курчатовский институт» (приказ № 1919 от 14.08.2019 г.).

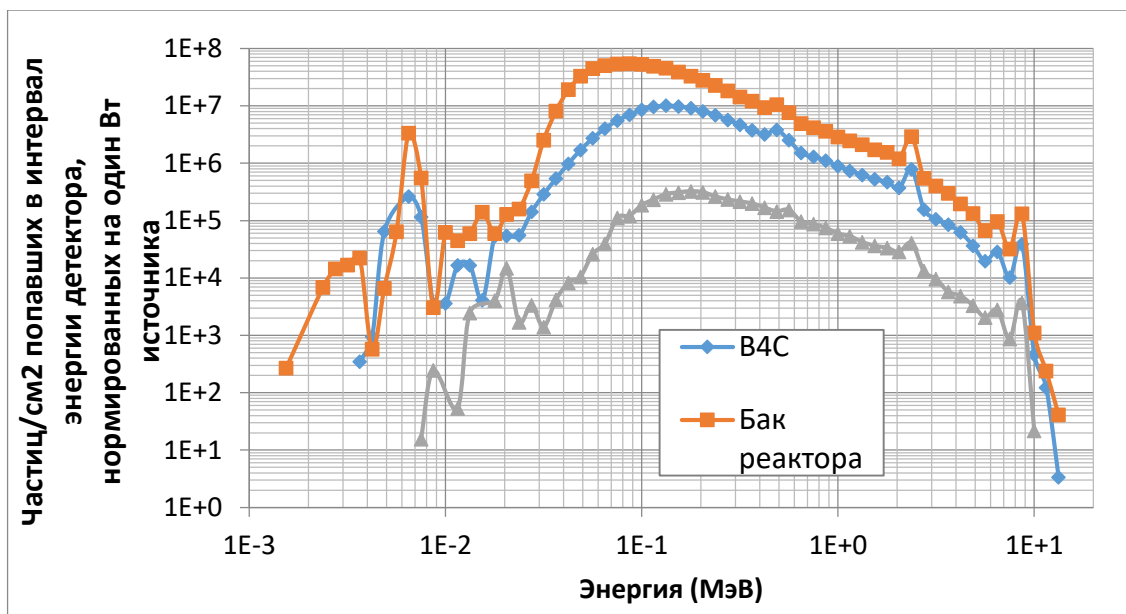


Рис.4. Спектры нейтронов на выходе из реактора и за слоями из карбида бора и за последующим блоком из слоёв стали и воды

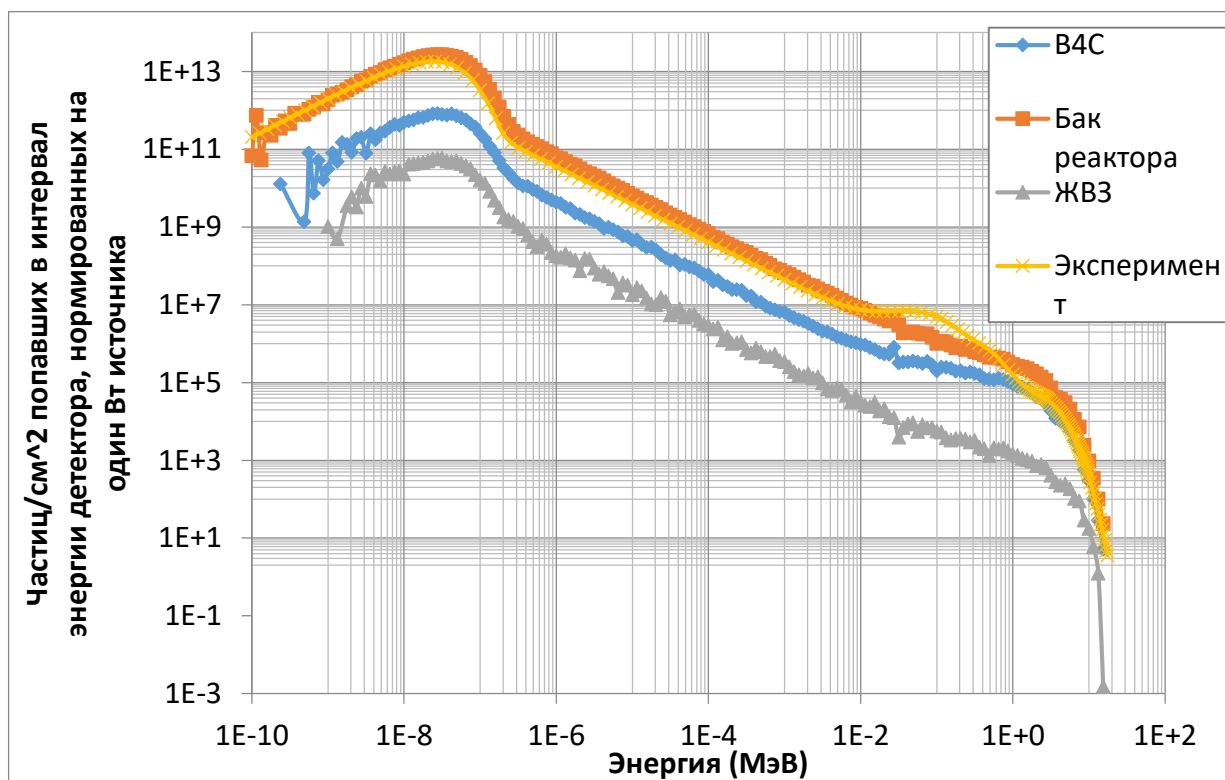


Рис. 2 Спектры пороговых энергий нейтронов на выходе из реактора и за слоями из карбида бора и за последующим блоком из слоев стали и воды

Литература

1. Коротеев А.А, Мадеев В.Г. Безопасность эксплуатации ядерных реакторных установок. Издательство МАИ, Москва 2001 г.
2. Стогов Ю.В. Основы нейтронной физики: Учебное пособие. - М.: МИФИ, 2008. – 204 с.
3. J F Briesmeister (Ed.) (2000). MCNP – a general Monte Carlo n-particle transport code, Version 4C. Report No. LA-13709-M. Los Alamos, LANL.
4. D Delacroix, J P Guerre, P Leblanc and C Hickman (2002). Radionuclide and Radiation Protection Data Handbook 2002, Radiation Protection Dosimetry, 98, 1.
5. H. Rahmanian, et al., Nucl. Instr. and Meth. A 477 (2002) 378.

УДК 533.72

Моделирование поведения монооксида углерода в ВЦС ЭГК методом решения численного уравнения Больцмана

Д.В. Щербаков¹, А.А. Бабайлов¹, В.В. Абанников¹

¹НИИЦ «Курчатовский институт»

В проектных разработках космических ядерных энергетических установок получили развитие термоэмиссионные реакторы-преобразователи на тепловых и промежуточных нейтронах [1]. Примесные газы, в частности, монооксид углерода взаимодействует с паром цезия при температуре ниже 1000 К при относительно высоких давлениях, что приводит к образованию конденсированных фаз углерода и карбоната цезия по реакции: $3 \cdot \text{CO} + 2 \cdot \text{Cs} = 2 \cdot \text{C} + \text{Cs}_2\text{CO}_3$ [2]. 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 давление газов в МЭЗ и приведет к снижению выходной электрической мощности ЭГК [3].

ГПРТ состоит из испарителя, трубопровода и конденсатора. Испаритель представляет собой два коаксиальных цилиндра в зазоре между которыми находится жидкий цезий при заданной температуре. Внутренний полый цилиндр имеет систему отверстий и верхнюю крышку. Пар цезия попадая в вакуумную систему, конденсируется на охлаждаемых стенках трубопровода (конденсатор) и стекает в испаритель. Для анализа газообразной смеси используется метод численного решения уравнения Больцмана [4]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \left(\frac{\mathbf{p}}{m}, \Delta\right) f = \int (f f'_1 - f f_1) g b d\mathbf{b} d\mathbf{p}_1$$

Для реализации метода численного решения уравнения Больцмана был создан программный комплекс на языке C++, позволяющий проводить расчеты для различных начальных и граничных условий. С помощью программного пакета GMSH возможно задание геометрии, степени дискретизации и разбиение сетки для проведения параллельных расчетов.

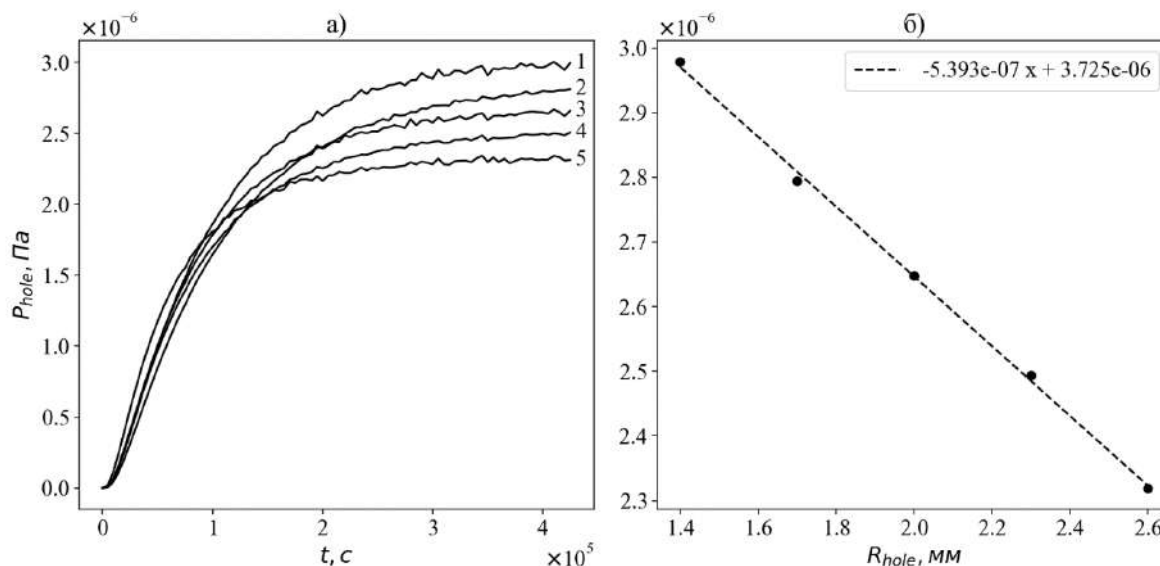


Рис. 1. Эволюция давления СО от времени диффузии для серии расчетов 1-3 (а) и зависимость давления СО от радиуса соединительного канала (б)

На рисунке 1 приведены графики полученных значений давления СО для серии расчетов с вариацией радиуса соединительного канала. Для оценки времени зарастания отверстия соединительного канала используется оценочная формула потока конденсации — массообмена на поверхности над жидкостью при процессах конденсации и испарении вещества [5]:

$$j = \frac{\beta(P - P_0)}{\sqrt{2\pi mkT}},$$

где P_0 – давление насыщенных паров монооксида, m – масса молекулы монооксида, а T – температура конденсирующегося газа. Исходя из полученных данных о зависимости давления СО от радиуса отверстия, время зарастания цилиндрического канала радиуса R можно оценить по формуле:

$$t_k = \frac{\rho}{m_1} \cdot \frac{\ln(R \cdot a/b + 1)}{a}$$

Были проведены расчеты для начального потока СО в ГПРТ $3 \cdot 10^{-11}$ м³Па/с, получено, что для данного потока давление в соединительном канале не превышает $2 \cdot 10^{-8}$ Па, а значит конденсация карбоната цезия происходит не будет и процесс зарастания отверстия остановится. Из экспериментальной зависимости потока СО от времени можно оценить, что время, за которое поток спадает настолько, чтобы процесс конденсации остановился составляет ≈ 30 часов. Зависимость радиуса отверстия, которое может зарастить, от времени работы реактора можно оценить по формуле:

$$R = \frac{m_1}{\rho \sqrt{2\pi mkT}} \left(P \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma} - P_0 t \right)$$

Для экспериментального коэффициента зависимости $\gamma = 0,0000975$ максимальное значение радиуса составляет 0,04 мм. Таким образом в процессе работы на пусковом режиме реактора зарастания отверстия происходить не будет, давление в соединительном канале будет падать быстрее, чем будет зарастать отверстие.

Работа выполнена при поддержке РФФИ проекты (20-08-00698, 20-08-00482, 20-08-00347) и НИЦ Курчатовский институт (приказ №1919 от 25.09.2020).

Литература

1. Алексеев С.В., Выбываец В.И., Гонтарь А.С. и др. Перспективные топливные материалы для термоэмиссионных ЯЭУ. Атомная энергия, т.115, вып.6, декабрь 2013, с.322–331.
2. Синявский В.В. Методы и средства экспериментальных исследований и реакторных испытаний термоэмиссионных электрогенерирующих сборок. М.: Энергоатомиздат. 2000. 375 с
3. Любимов Д.Ю., Федик И.И., Шумилов А.А. Влияние продуктов деления на выходную мощность термоэмиссионных ЭГК с сообщающимися и разделенными полостями твэла и межэлектродного зазора. Атомная энергия, т.110, вып. 6, 2011, с.321–327.
4. Черемисин Ф.Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Докл. РАН. 1997. — Т. 357, № 1. — С. 53–56.
5. Розанов Л.Н. Вакуумная техника. - Москва. Изд. "Высшая школа", 1990, с. 32.

УДК 533.72

Оценка изменения изотопного состава конструкционных материалов ТВС и их активности

И.Ю. Перминов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

В настоящее время в ядерной отрасли происходит очень быстрое развитие. Вслед за развитием самой отрасли возрастают и объемы ядерных отходов, которые требуют дальнейшей переработки, либо захоронения [1]. Используемые ныне конструкционные материалы ТВС, погружаемых в ядерных реактор, подвергаются воздействию мощного нейтронного излучения, в результате чего меняется изотопный состав стенок ТВС, что ведет за собой изменение как физических, так и химических свойств материала, а также, что немаловажно – происходит накопление радиоактивности, тем самым возрастает и время дислокации таких отходов в бассейнах выдержки возле АЭС, но зачастую эти бассейны переполняются отходами, в связи с тем, что выдержка отработавшего топлива занимает слишком много времени [2].

В качестве конструкционных материалов для ТВС используются легированные сплавы, такие, как: Э110, Э635, Э365 и многие другие [3]. Соответственно, различие изотопного состава порождает и различное поведение под действием нейтронного излучения, а также, активность таких сплавов может значительно отличаться после кампании ядерного топлива в реакторе [4].

Таким образом, целью работы являлось исследование и сравнение активностей конструкционных материалов ТВС после кампании реактора. Было определено какой сплав наиболее пригоден для использования в подобных условиях, а также, выявлен наиболее устойчивый к нейтронному облучению материал. В рамках работы использовался математический пакет Wolfram Mathematica. Работа позволила осуществить прогноз изменения изотопного состава и остаточной активности ТВС после её извлечения из зоны облучения, что необходимо для дальнейшего изучения радиационной стойкости циркониевых сплавов.

Математическое моделирование, по сравнению с практическим исследованием, значительно экономит временные и материальные ресурсы, но уступает в воссоздании реальной среды, а производит расчет в условиях, приближенных к идеальным.

Литература

1. Белозоров Д. П., Давыдов Л. Н. Современные проблемы ядерной энергетики // Вестник Харьковского университета: «Ядра, частицы, поля». – 2007. – №. 777. – С. 32.
2. Хвостова М. С. Экологические проблемы накопления отработавшего ядерного топлива в России // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Экология и безопасность жизнедеятельности. – 2012. – №. 2. – С. 48.
3. Митрофанов Н. М., Целищев А. И., Агеев В. С. и др. Конструкционные материалы для оболочек ТВЭЛов и чехлов ТВС реакторов / Под редакцией Решетникова Ф. Г., Шкабура И. А. // Москва. Труды ВНИИИНМ. – 2011. – С. 211.
4. Мерджанов А. Г., в. кн.: Физическая химия. Современные проблемы, под редакцией Я. М. Колотыркина // Москва. –1983. – №. 1. – С. 6-45.

УДК 544.452.5

Поверхность потенциальной энергии для окисления цикlopента[b]нафтадена C₁₃H₉

Гильдина А.Р.¹, Мебель А.М.², Аязов В.Н.^{1,3}

¹Самарский национальный исследовательский университет

²Международный университет Флориды

³Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Выполнялся расчет поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) для реакции цикlopента[b]нафтадена C₁₃H₉ с молекулярным кислородом O₂ с использованием современных квантово-механических расчетных методов [1], что позволит найти наиболее вероятные реакционные пути, ведущие к разрушению пяти- и шестичленных колец [2]. Полученные в результате расчетов значения энергии и частот участвующих в реакции соединений, будут затем использованы для расчета кинетических констант и коэффициентов ветвления с использованием методов статистической физики.

Расчеты *ab initio* были использованы для нахождения оптимизированной структуры изомеров и переходных состояний, принадлежащих данной ППЭ. Геометрии реагентов, различных интермедиатов, переходных состояний, относящихся к ППЭ рассматриваемых реакций оптимизированы на уровне теории функционала плотности B3LYP/6-311G(d,p). Энергии соединений, участвующих в реакции, уточнены с применением модифицированной композиционной схемы, включающей расчет с применением теории связанных кластеров (CCSD(T)). Одноточечные расчеты энергии различных соединений для заданных геометрий были уточнены с применением моделей использования методов G3, в частности таких как G3(MP2,CC). Расчет по ТФП и теории связанных кластеров реализован в программе Gaussian 09[3] и MOLPRO 2010. В результате расчета было предсказано формирование наиболее вероятных продуктов реакции, таких как цикlopента[b]нафтален-1-он + ОН (рис.1). Все расчеты были проведены с использованием суперкомпьютера Королев.

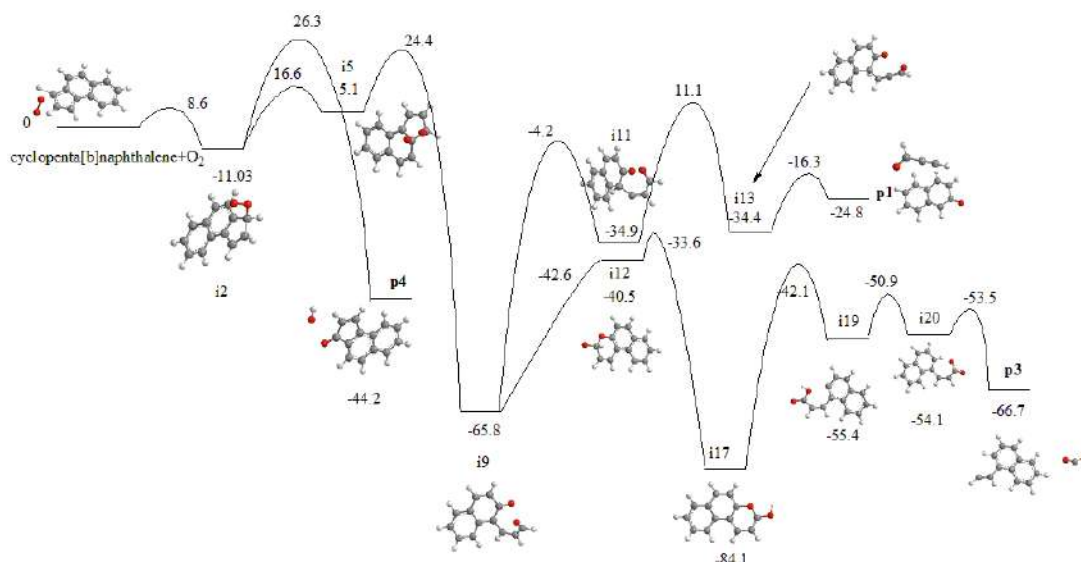


Рис. 1. Главные реакционные пути для $C_{13}H_9 + O_2$, ведущие к цикlopента[b]нафтален-1-ону $C_{13}H_8O + OH$ (P4), 2-нафтолату+ пропиал (P1), $C_{12}H_9 + CO_2$ (P3)

Литература

1. Frenklach M. Reaction mechanism of soot formation in flames // Phys. Chem. Chem. Phys. 2002. V.4, P. 2028–2037.
2. Ghildina A. R., Porfiriev D. P., Mebel A. M., Azyazov V. N. Scission of the Five-Membered Ring in 1-H-Inden-1-one C_9H_6O and Indenyl C_9H_7 in the Reactions with H and O Atoms //The Journal of Physical Chemistry A. 2019. V.123, P. 5741-5752.
3. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. *Gaussian, Inc., Wallingford, CT*. 2009.

УДК 621.039.56

Регулирование мощности энергоблока с ВВЭР-1200 в маневренных режимах

И.С. Худяков

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

Для стадийной работы энергосети необходимо поддерживать номинальное значение частоты тока в сети – 50 Гц. Данное значение может уменьшаться или увеличиваться в зависимости от баланса между потребляемой и производимой мощностями в энергосети. Если потребляемая мощность становится больше или меньше производимой, частота, соответственно, уменьшается или увеличивается.

Режимы изменения мощности энергоблока с целью регулирования нагрузки энергосети называются маневренными режимами. Существует несколько видов маневренных режимов, зависящих от типа изменения нагрузки энергосети. При случайных изменениях нагрузки используется первичное регулирование частоты (ПРЧ). Оно обеспечивает компенсацию случайных изменений нагрузки в автоматическом режиме. Оно, в свою очередь, разделяется на нормированное первичное регулирование (НПРЧ, обеспечивает компенсацию многочисленных, но незначительных по величине возмущений нагрузки) и общее первичное регулирование (ОПРЧ, обеспечивает компенсацию при аварийных отключениях крупных потребителей или производителей электроэнергии). ПРЧ стабилизирует частоту тока на уровне, который может отличаться от номинального значения. Восстановление номинального значения частоты тока и восстановление исходной мощности энергоблоков, изменивших нагрузку в режиме ПРЧ, обеспечивается за счет вторичного регулирования частоты (ВРЧ) мощностями других специально выделенных для этой цели энергоблоков. Плановые изменения нагрузки, связанные с суточными, недельными и сезонными изменениями потребления электроэнергии, осуществляются в режиме следования за нагрузкой.

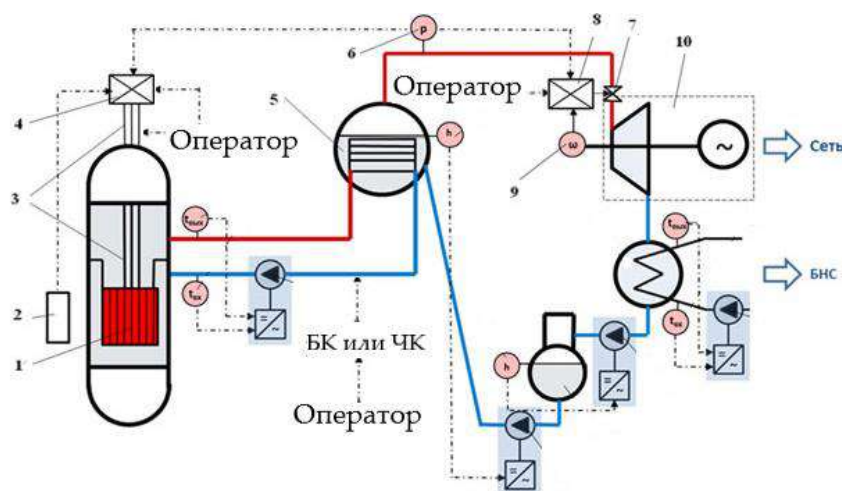
Величина мощности реактора характеризуется плотностью нейтронного потока, давлением пара в парогенераторе (ПГ) и главном паровом коллекторе (ГПК). Таким образом, автоматический регулятор мощности реактора (АРМР) может либо поддерживать определённое значение нейтронной мощности, либо изменять ее в заданном темпе - режим Н. Или же АРМР может поддерживать заданное давления пара – режим Т [1]. В свою очередь специально для маневренных режимов предназначается режим Ср, соответствующий режиму Т с расширенной зоной нечувствительности АРМР.[2] В особых случаях допускается работа с отключенным АРМР (режим 0). Также управление может осуществляться при помощи борного регулирования путем ввода в первый контур борного концентрата (БК) или чистого конденсата (ЧК) оператором в ручном режиме. Электрическая мощность энергоблока определяется мощностью турбогенератора (ТГ). Управление его мощностью осуществляется изменением расхода пара на турбину при помощи стопорно-регулирующих клапанов (СРК) турбины, под действием системы регулирования турбины (СРТ). Она, в свою очередь, может работать либо поддерживая электрическую мощность ТГ, либо изменять ее в заданном темпе - режим РМ. Или поддерживать давления пара в заданном диапазоне - режим РД [1]. При работе энергоблока в режиме маневрирования основным режимом работы СРТ является режим РМ. При этом АРМР должен работать в режиме Т или Ср [2].

Традиционно регулирование мощности ВВЭР при работе в базовом режиме основано на сохранении баланса между мощностью реактора и мощностью турбины за счет поддержания заданного давления пара в ГПК – программа Pconst [3]. Зависимость заданного номинального давления пара от мощности реактора называется статической программой регулирования мощности. Но также используется и комбинированная программа (Tconst), которая за счет изменения давления пара обеспечивает поддержание постоянной средней температуры теплоносителя в реакторе при мощности выше определенного значения и поддержание постоянного давления пара при мощности ниже этого значения.

При поддержании постоянного давления пара изменение мощности реактора сопровождается изменением средней температуры теплоносителя, что вводит дополнительную реактивность и требует дополнительных перемещений органов регулирования системы управления и защиты (ОР СУЗ). Этот эффект отсутствует при поддержании постоянной средней температуры теплоносителя, соответственно, при изменении мощности требуется меньшая амплитуда перемещения ОР СУЗ. Давление второго контура поддерживается в диапазоне $P_{nom} \pm \Delta P$ (ширина зоны нечувствительности), который называется зоной нечувствительности регулятора АРМР (или СРТ) по давлению пара. При работе АРМР в режиме Т используется узкая зона нечувствительности т.е. жесткое температурное регулирование, а в режиме Ср используется расширенная зона нечувствительности - мягкое температурное регулирование. Схема управления мощностью энергоблока представлена на рисунке 1.

Работа энергоблока в перечисленных режимах требует различных алгоритмов управления. Так как во время ПРЧ изменения мощности случайны, то управление должно осуществляться автоматически. Изменение мощности РУ осуществляется с помощью ОР СУЗ под управлением АРМР или в ручном режиме оператором. Для минимизации перемещения ОР СУЗ и, как следствие, влияния на надежность механизмов перемещения предпочтительно использовать обратные связи по температуре – мягкое температурное регулирование путем изменения температуры теплоносителя. В случае ВРЧ, при незначительных изменениях мощности алгоритмы управления аналогичны рассмотренным для ПРЧ.

При случае следования за нагрузкой используются алгоритмы минимизации оффсета и локализации ксеноновых процессов. Первый заключается в поддержании минимального отклонения фазовой точки оффсет-мощностной диаграммы от рекомендуемой области и реализуется в основном за счет работы ОР СУЗ; также используется мягкое температурное регулирование. Борное регулирование используется для компенсации нестационарных ксеноновых процессов. В соответствии со вторым способом возбуждаются ксеноновые колебания в активной зоне, в результате, перемещение управляющих групп ОР СУЗ обеспечивает одновременно компенсацию отравления реактора и подавление аксиальных ксеноновых колебаний без участия борного регулирования. В этом способе также используется мягкое температурное регулирование.



1 – активная зона реактора, 2 – датчик нейтронной мощности, 3 – ОР СУЗ, 4 – АРМР, 5 – ПГ, 6 – датчик давления пара, 7 – СРК турбины, 8 – СРТ, 9 – датчик частоты вращения, 10 – ТГ.

Рис. 1. Схема управления мощностью энергоблока.

Литература

1. В.Е Баскаков, М.В Максимов, О.В Маслов. Алгоритм эксплуатации энергоблока с ВВЭР в поддержании суточного баланса мощности энергосистемы. Труды Одесского политехнического университета, 2007, вып.2(28).
2. Ю.К. Тодорцев, Т.В. Фоц, М.В Никольский. Анализ методов управления мощностью энергоблока с водяным реактором при маневрировании. восточно-Европейский журнал передовых технологий ISSN 1729-3774. 6/8 (66) 2013.
3. Аверьянова С.П., Дубов А.А., Косоуров К.Б., Семченков Ю.М., Филимонов П.Е. Развитие способов управления ввэр-1200/1300 в суточном графике нагрузки. Атомная энергия, т. 114, вып. 5, май 2013.

УДК 621.039.51

Решение задач нестационарных процессов энергетического реактора нептуна (флуктуации амплитуды импульса, возможность колебательной неустойчивости) с использованием кода SERPENT

Е.П. Шабалин¹, А.А. Хассан^{1,2}, М.В. Рзянин¹, К.В. Булатов¹

¹Объединенный институт ядерных исследований

²Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

Импульсные исследовательские реакторы периодического действия типа ИБР-2 в Дубне являются наиболее эффективными источниками медленных нейтронов на выведенных пучках для исследований структур различного рода материалов с помощью методов дифракции, мало-углового рассеяния, рефлектометрии, неупругого рассеяния и нейтронографии, благодаря короткому импульсу нейтронов и высокому среднему потоку в пике до $10^{14} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$. В то же время, из-за особенностей кинетики и флуктуации мощности энергии в импульсах в таком реакторе в десятки раз выше, чем в стационарных реакторах, что создаёт проблемы для управления аппаратом. В работе предложен и обоснован оригинальный способ значительного снижения уровня колебаний импульсов мощности таких реакторов на примере проекта импульсного реактора ИБР-3 (НЕПТУН) с пороговым изотопом Np-237 в качестве ядерного топлива.

Np-237[1] — это искусственный изотоп с периодом полураспада $2,14 \cdot 10^6$ лет. он образуется внутри ядерного топлива в результате бета-распада U-237 (образуется в быстрых реакторах по реакции (n, 2n) в U-238) или путем двойного захвата в U-235 в тепловых реакторах. один реактор ВВЭР может производить 13 кг Np в год. Нептуний считается одним из самых значительных отходов отработавшего топлива. А извлечение и повторное использование Np в качестве ядерного топлива поможет решить проблему отработавшего топлива и замкнуть ядерный топливный цикл.

Np-237 является пороговым изотопом, он эффективно делится при энергии нейтронов 0,4 МэВ. Это пороговый характер сечения деления дает Np следующие преимущества:

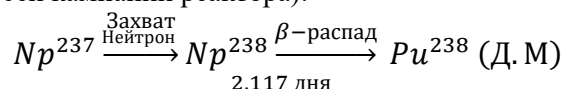
1) Предлагаемый источник будет иметь пиковую плотность потока нейтронов до $5 \cdot 10^{16}$ н.с⁻¹.см⁻² и среднюю по времени плотность потока — до 10^{14} н.с⁻¹.см⁻² (на ИБР – 2М: $0.7 \cdot 10^{16}$ и 10^{13}).

2) Время жизни поколения быстрых нейтронов (τ) в зоне с нептунием в 5-7 раз меньше, чем в зоне с плутонием (облегчается задача иметь короткую вспышку нейтронов).

3) Низкое значение доли запаздывающих нейтронов (β -эф) определяет малую фоновую мощность в промежутках между импульсами (в 3-4 раза меньше).

4) Возможность использования для модулятора реактивности материалов, замедляющих нейтроны (высокотемпературные гидриды металлов TiH_2 , YH_2).

5) Отсутствует эффект реактивности от выгорания топлива (можно работать без догрузки топлива в течение всей кампании реактора):



Проблема нестационарных процессов мощности реактора (флуктуации амплитуды импульсов, возможности колебательной неустойчивости).

Для рассматриваемой в настоящее время конструкции реактора Нептун значение импульсной доли запаздывающих нейтронов оценивается величиной $3 \div 3.5 \cdot 10^{-5} K_{эфф}$, которую едва ли можно считать приемлемой. Однако конструкция реактора, в особенности выбор ядерного топлива нитрид нептуния-237 ($Np_{237}N$), позволяет увеличить импульсную долю запаздывающих нейтронов, заметно не ухудшая физические характеристики.

Из кинетической теории реакторов типа ИБР следуют выражения для оценки длительности импульса и импульсной доли запаздывающих нейтронов: [2, 3]

$$\theta_{эфф} \cong \left(\frac{\bar{\tau}}{\alpha V^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1)$$

$$\beta_{имп} \cong 0.5 (\alpha V^2 \bar{\tau}^2)^{\frac{1}{3}}, \quad (2)$$

где ($\theta_{эфф}$) - длительность импульса, (α) - коэффициент параболы реактивности модулятора реактивности (МР), (V) - линейная скорость МР, ($\bar{\tau}$) - среднее время «жизни» поколения нейтронов, а ($\beta_{имп}$) - «импульсная доля запаздывающих нейтронов».

Разброс мощности энергии импульсов Q в реакторах типа ИБР определяется флуктуациями реактивности $\Delta\rho$ и величиной «импульсной доли запаздывающих нейтронов» $\beta_{имп}$ как показано в уравнении (3):

$$Q \cong Q_{ном} \times e^{\left(\frac{\Delta\rho}{\beta_{имп}} \right)} \quad (3)$$

Для реактора Нептун $\alpha \approx 10^{-4}$ см⁻², $V = 62$ м/с и $\tau = 10$ нс; соответственно, согласно (2) $\beta_{имп} = 3.5 \cdot 10^{-5}$.

При таком значении $\beta_{имп}$ флуктуации реактивности порядка $\pm 10^{-5} K_{эфф}$ вызовут разброс мощности энергии импульсов $\pm 33\%$, а при флуктуациях реактивности $\pm 2.5 \cdot 10^{-5} K_{эфф}$ размах колебаний мощности импульсов достигнет уже $2 Q_{ном}$, что можно считать предельно допустимым. Флуктуации реактивности $\pm 2.5 \cdot 10^{-5}$ не столь малы, чтобы считать их ничтожными. **Поэтому было бы крайне желательно увеличить $\beta_{имп}$.** Помимо проблемы флуктуаций импульсов, существует ещё одна причина иметь более высокое значение $\beta_{имп}$ импульсной доли запаздывающих нейтронов. Это – возможное развитие колебательной неустойчивости типа той, что наблюдается на ИБР-2М. Можно сказать, что порог неустойчивости также связан с $\beta_{имп}$. [4, 5, 6]

Техническое решение и качественные соображения в проблеме снижения флуктуаций мощности в реакторе НЕПТУН:

Повышение времени жизни поколения нейтронов в реакторе Нептун достигается добавлением на периферию активной зоны изотопов, делящихся на эпи-тепловых нейтронах: плутоний-239 или уран-235, посмотри рисунок 1

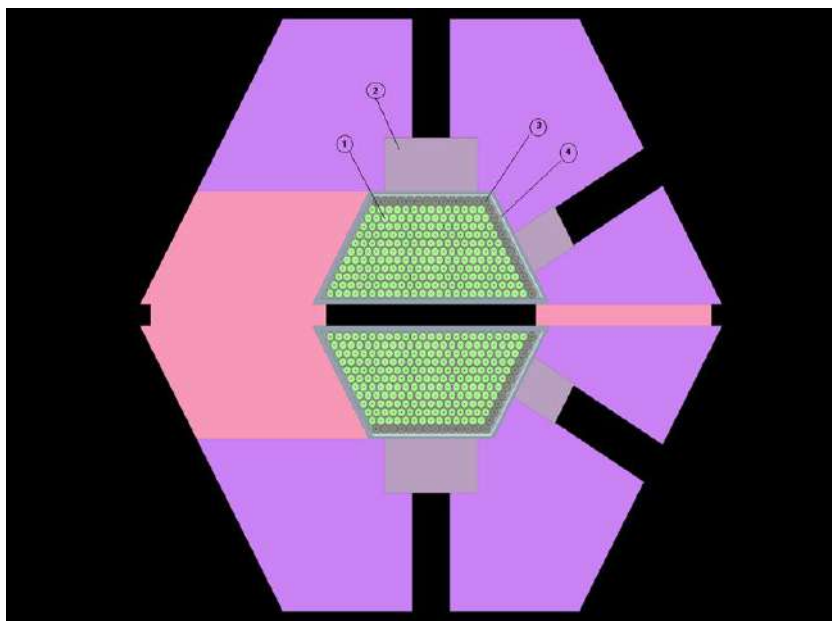


Рис. 1. Активная зона Нептуний с добавкой U-235 или Pu-239 на периферии.
1- ТВЭЛ NpN. 2- водяной замедлитель. 3- твэл с приставками. 4- слой Gd.

Для Pu-239, будет первый резонанс деления – 0.3 эВ. Максимум сечения – 3000 барн, минимум (в интервале 0.2 -0.4 эВ) - 1000 барн. Длина поглощения в нитриде плутония (90 % Pu-239) соответственно 0.2-0.3 мм; в нитриде непутия (вне резонансов 0.5 эВ и ~1.1 эВ) – около 1.5 мм. Посмотрите рисунок (2 и 3).

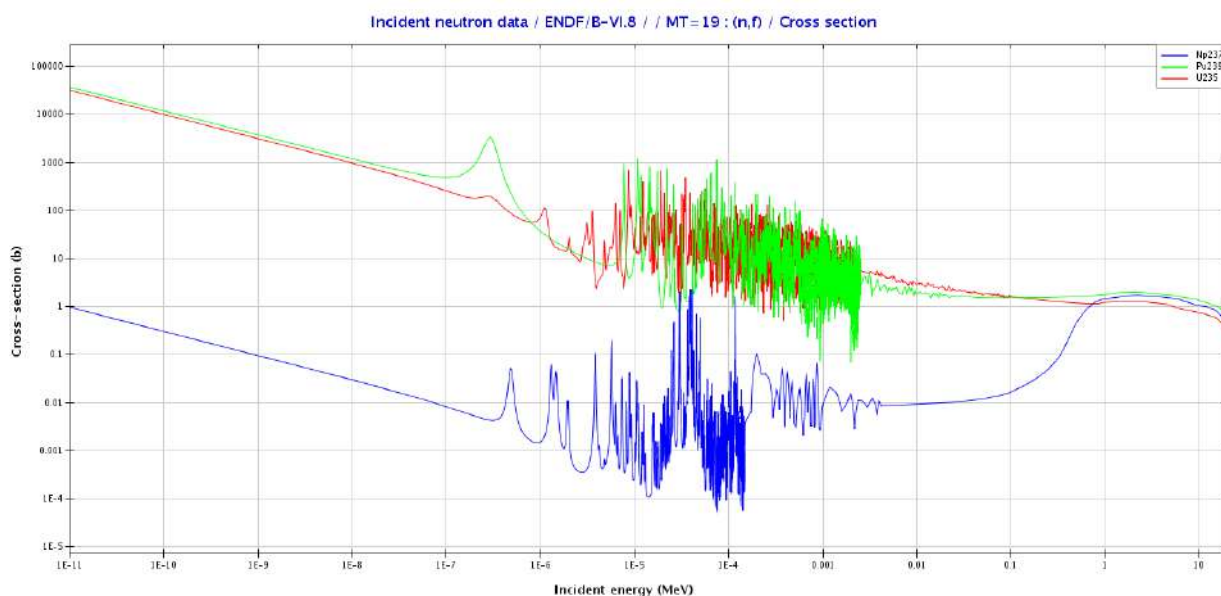


Рис. 2. Сечение деления Pu-239, U-235 и Np-237.

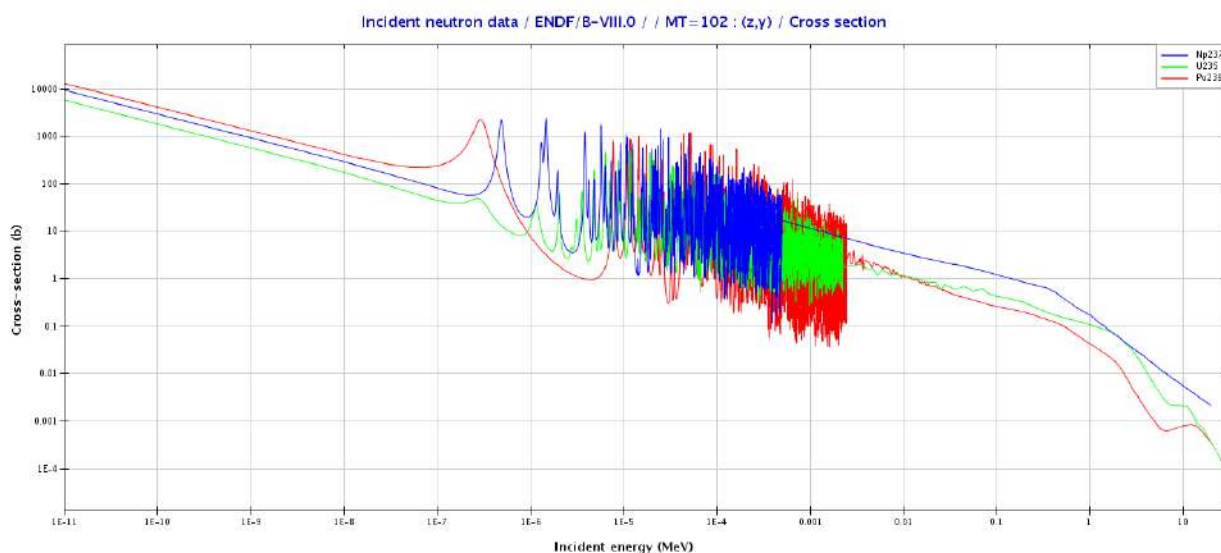


Рис. 3. Сечение поглощения Pu-239, U-235 и Np-237.

В случае U-235, работает зона энергий между двумя резонансами захвата нептуния (около 0.5 эВ и ~1.1 эВ). Сечение поглощения нейтронов ураном-235 в диапазоне 0.7-1 эВ - 80- 110 барн, в то время как нептунием – 20 барн. Отношение деления к поглощению для урана-235 – около 0.8. Таким образом, длина поглощения нейтронов этого диапазона при равной доле урана и нептуния составит 5 -7 мм, т.е. достаточно доли урана несколько больше 50 % для полного поглощения эпитепловых нейтронов. Посмотрите рисунок (2 и 3).

В данной работе SERPENT-2.31 использовался для расчета времени жизни генерации, распределения мощности твэлов в активной зоне, изменения реактивности из-за добавления Pu-239 или U-235. Код SERPENT – 2.31 представляет собой трехмерный код переноса нейтронов и выгорания методом Монте-Карло. Библиотека ENDF / B-VII.0 использовался для получения непрерывных данных микроскопического поперечного сечения.

Четыре различных состава с разным содержанием U-235 и Pu-239 и три разные толщины Gd-фильтра (с концентрацией Gd = 5 E21 атом / см³) были испытаны, чтобы выбрать наиболее подходящий состав и концентрацию для достижения желательного времени генерации.

В первом ряду рядом с водяным замедлителем (см. Рисунок 2) топливные композиции (NpN) были заменены на один из следующих составов:

- 1) PuN + NpN, в различных объемных процентах (10 + 90, 15 + 85 и 20 + 80 об.% Для PuN и NpN соответственно).
- 2) Pu + ZrN, в различных объемных процентах (10 + 90, 15 + 85, 20 + 80 и 25 + 75 об.% Для PuN и ZrN соответственно).
- 3) UN при разном обогащении по U-235 (25%, 50% и 60%).
- 4) UN + NpN при различных объемных процентах и обогащении по U-235 (40 + 60 об.% И обогащение 40% - 40 + 60 об.% И обогащение 90% и 50 + 50 об.% И обогащение 50%).

И каждый из предыдущих вариантов был протестирован с тремя разными толщинами Gd-фильтра (0,1, 0,3 и 0,5 см).

Полученные результаты:

Результаты времени генерации, эффективная доля запаздывающих нейтронов ($\beta_{\text{эфф}}$), изменение реактивности от добавления Pu и U и распределение энергии выделения по активной зоне при различных составах и различной толщине Gd-фильтра показаны в таблицах 1 и 2 и на рисунке 4.

Variant		Generation time,nano sec	$\beta\text{-eff} * E\text{-}3$	$\Delta \rho$, pcm	$\Delta \rho$, % $\Delta K/K$
Reference case		8,4762	1,31391	0	0
UN 25% Enrichment	0,1 cm, Gd	46,9486	1,46243	-159,43475	-0,159434751

	0,3 cm, Gd	37,7034	1,4534	-318,48106	-0,318481058
	0,5 cm, Gd	38,6412	1,45261	-335,98076	-0,335980761
UN 50% Enrichment	0,1 cm, Gd	59,0742	1,57596	1126,37619	1,126376195
	0,3 cm, Gd	48,4536	1,56761	1043,22178	1,043221779
	0,5 cm, Gd	48,0078	1,57789	981,431955	0,981431955
UN 60% Enrichment	0,1 cm, Gd	62,2116	1,62449	1664,66166	1,664661659
	0,3 cm, Gd	50,7453	1,62581	1578,91298	1,578912985
	0,5 cm, Gd	51,6313	1,6344	1505,41608	1,505416079
UN+NpN(40+60%) & enrichment 40%	0,1 cm, Gd	28,2302	1,39568	88,6501338	0,088650134
	0,3 cm, Gd	20,3188	1,414	12,8050204	0,01280502
	0,5 cm, Gd	20,6145	1,35598	-124,57032	-0,124570318
UN+NpN(40+60%) & enrichment 90%	0,1 cm, Gd	39,6506	1,48736	1274,43958	1,274439581
	0,3 cm, Gd	29,711	1,47121	1150,49043	1,150490425
	0,5 cm, Gd	29,2939	1,47914	1035,16681	1,035166811
UN+NpN(50+50%) & enrichment 50%	0,1 cm, Gd	32,9303	1,42851	454,300428	0,454300428
	0,3 cm, Gd	25,7223	1,44356	423,483148	0,423483148
	0,5 cm, Gd	25,4126	1,46448	259,999816	0,259999816

Таб. 1. Результаты добавления уран при различной толщине фильтра Gd

Variant		Generation time,nano sec	β -eff * E-3	$\Delta\rho$, pcm	$\Delta\rho$, % $\Delta K/K$
Reference case		8,4762	1,31391	0	0
PuN+NpN (10+90%)	0,1 cm, Gd	28,8698	1,35344	560,196	0,56019587
	0,3 cm, Gd	19,9979	1,35065	431,643	0,431642605
	0,5 cm, Gd	18,4939	1,34367	296,378	0,296377941
PuN+NpN (15+85%)	0,1 cm, Gd	31,9024	1,3655	869,288	0,869288058
	0,3 cm, Gd	22,8413	1,36884	733,463	0,733463365
	0,5 cm, Gd	20,9895	1,35427	605,379	0,605378507
PuN+NpN (20+80%)	0,1 cm, Gd	34,7719	1,37297	1315,387	1,315387144
	0,3 cm, Gd	25,5695	1,37452	1168,345	1,168344886
	0,5 cm, Gd	22,8305	1,37328	1025,320	1,025319988
PuN+ZrN (10+90%)	0,1 cm, Gd	37,4135	1,35776	-614,067	-0,61406683
	0,3 cm, Gd	29,2075	1,34824	-706,811	-0,70681118
	0,5 cm, Gd	27,02	1,36186	-799,734	-0,79973443
PuN+ZrN (15+85%)	0,1 cm, Gd	40,7232	1,37783	-229,240	-0,22923982
	0,3 cm, Gd	31,0197	1,35653	-335,981	-0,33598076

	0,5 cm, Gd	31,0756	1,36776	-414,347	-0,41434711
PuN+ZrN (20+80%)	0,1 cm, Gd	44,789	1,38156	148,875	0,148874892
	0,3 cm, Gd	34,2212	1,37801	42,061	0,042060767
	0,5 cm, Gd	34,0376	1,38031	-51,254	-0,05125439
PuN+ZrN (25+75%)	0,1 cm, Gd	48,1444	1,38977	514,065	0,5140653
	0,3 cm, Gd	37,1883	1,40012	408,974	0,408973993
	0,5 cm, Gd	35,791	1,39042	324,552	0,324551907

Таб. 2. Результаты добавления Pu при различной толщине фильтра Gd

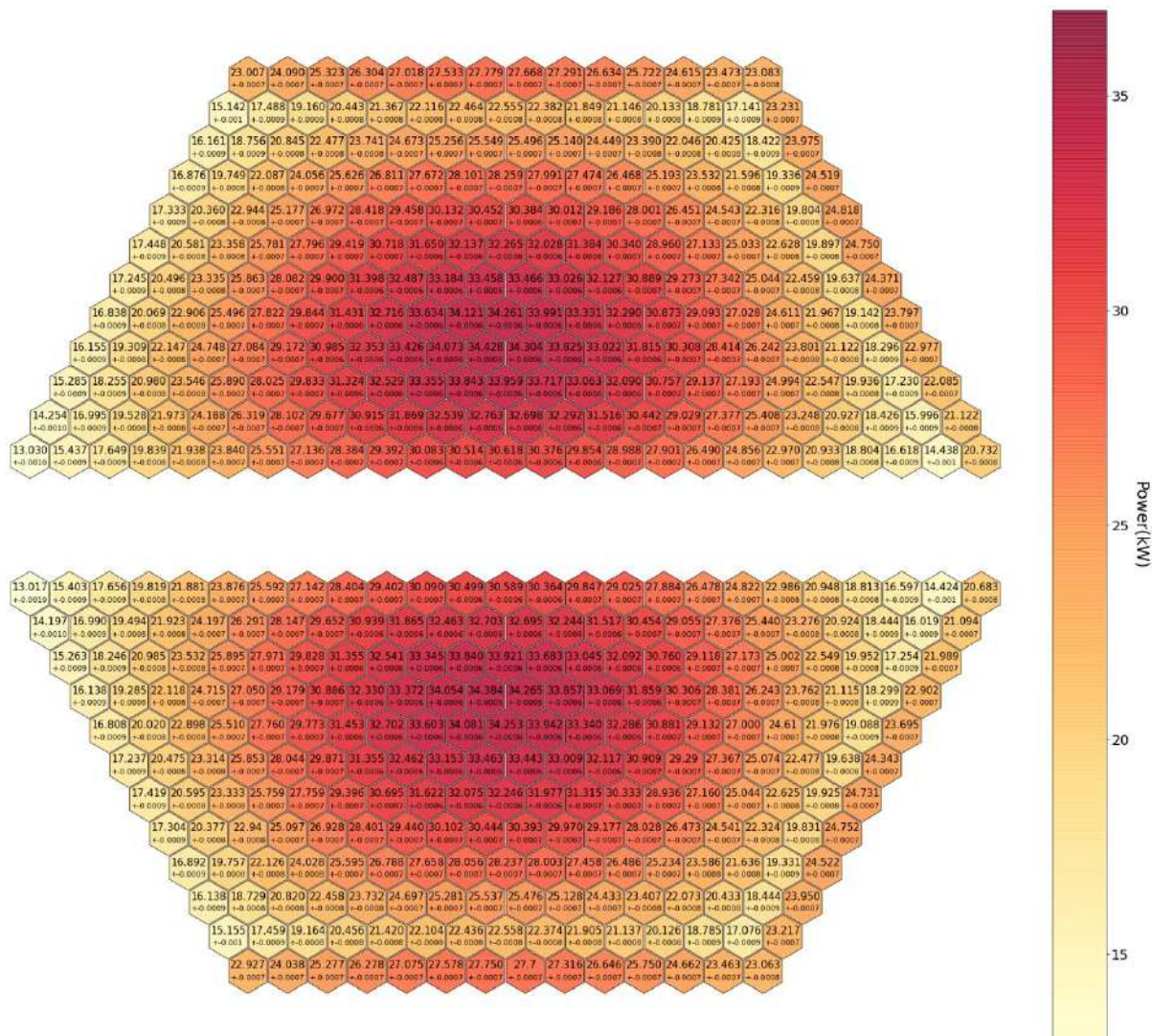


Рис. 4. Распределение энергии выделения по активной зоне для UN + NpN (40 + 60 об. %) И при обогащении 90% и 3 мм Gd - фильтр.

По результатам сравнения наиболее подходящим составом топлива на периферии является UN + NpN (40 + 60 об. %) И при обогащении 90% и 3 мм Gd – фильтра. У этого варианта низкое энерговыделение в центре и близь к МР и максимальное на периферии и лучшее энергораспределение во всей активной зоне.

Литература

1. Seifritz, W., P.J.N.S. Wydler, and Engineering, *Criticality of neptunium-237 and its possible utilization in nuclear reactors*. 1979. 72(2): p. 272-276.
2. Шабалин, Е.П., *Импульсные реакторы на быстрых нейтронах*. 1976: Атомиздат.

3. Бондаренко, И. and Ю.А.э. Стависский, Импульсный режим работы быстрого реактора I. 1959. 7(5): p. 417-420.
4. Aksenov, V., et al., On the limit of neutron fluxes in the fission-based pulsed neutron sources. 2017. 14(5): p. 788-797.
5. Шабалин, Е., et al., Высокопоточный импульсный исследовательский реактор на основе нептуния. 2018. 124(6): p. 309-314.
6. Vinogradov, A., et al., Proton-Accelerator Driven High-Flux Pulsed Neutron Source for Beam Research. 2019. 16(6): p. 952-966.

УДК 534-16

Численные исследования анизотропии трещиноватых сред

Н.Ю. Романенко^{1,2}, Н.И. Хохлов^{1,2}, Ю.Ю. Клосс^{1,2}, П.В. Стогний¹

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Современные методы интерпретации сейсмических данных используют различные методы моделирования сейсмических волн. Численное моделирование является важным составляющим этапом при проведении геологоразведочных работ. Одно из направлений численного моделирования связано с моделированием откликов от трещиноватых структур. Зоны разломов и трещин обнаружены во многих рудных и нефтегазовых месторождениях и играют важную роль в исследовании и анализе сейсмических данных. Они также могут оказывать большое влияние на результат сейсмической инверсии и миграции.

Чтобы построить точную модель месторождения и разработать оптимальные методы его эксплуатации, следует создать достаточно хорошую общую модель геологической среды, которая требует точной учет свойств и положений трещин [1]. За последние несколько десятилетий был проведён ряд исследований в этой области [2-8]. Тем не менее разработка численных методов моделирования трещиноватых неоднородностей является областью активных исследований.

Исследование анизотропии трещиноватых сред может проводится при помощи численного моделирования. В данной работе рассматривается модель идеального изотропного линейного упругого материала. Один из методов, для моделирования распространения динамических волновых возмущений, это сеточно-характеристический метод. Сеточно-характеристический метод (GCM) использует характеристические свойства систем гиперболических уравнений, описывающих распространение упругих волн [9]. Сам сеточно-характеристический метод подробно описан в [10] и широко применяется для моделирования распространения динамических волновых процессов в гетерогенных средах, в том числе в средах с трещинами. Целью данной работы является проведение численного моделирования для кластера субвертикальных трещин, анализ временной и кинетической анизотропии среды. Для численного решения поставленной задачи применяется сеточно-характеристический метод.

Анализ анизотропии производился на следующей модельной задаче. Схема постановки задачи показана на рис. 1а (1б - интерпретация результатов численного моделирования для 30 трещин):

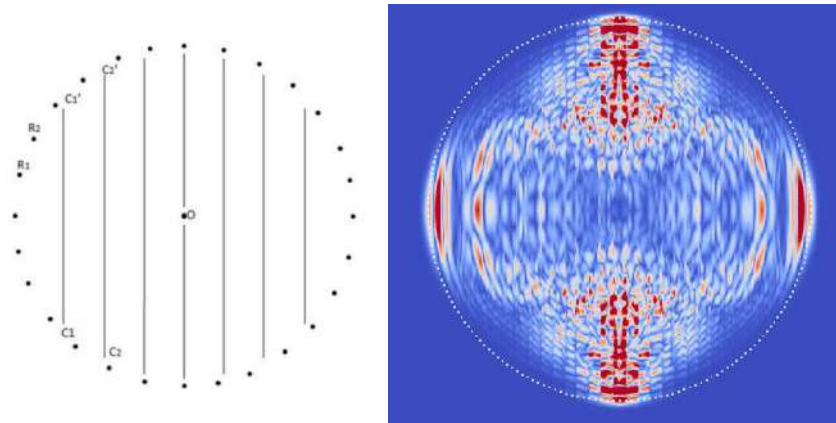


Рис. 1.(а, б)

Здесь т. О – источник; C_1C_1' , C_2C_2' , ... – трещины, $R_1, R_2, \dots$ – приёмники.

Источник находится в центре. Размер области $2000 \times 2000 \text{ м}^2$. Трещины занимают пространство $R = 250 \text{ м}$ вокруг источника. $N = 200$ приемников расположены равномерно вокруг области с трещинами (на расстоянии $h = 10 \text{ м}$). Волна создается единичным импульсом: $(1 - 0.5v) * \exp(-0.25v)$, где $v = \omega^2 t^2$, $\omega = 2\pi f$. Исследование производилось для разного числа трещин при различных импульсах.

Были получены и проанализированы результаты временной и кинетической анизотропии для кластера субвертикальных трещин. Исследована зависимость анизотропии от числа трещин и частоты сигнала. Установлено, что при увеличении частоты импульса, кинетическая и временная анизотропия становится более выраженной при росте числа трещин.

Предложенный подход может быть использован для интерпретации сейсмических данных в районах со сложными трещиноватыми геологическими структурами, типичными для месторождений полезных ископаемых.

Исследования выполнены при финансовой поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (приказ №1808 от 14.08.2019).

Литература

1. Karayev, N.; Levyant, V.; Petrov, I.; Karayev, N.; Muratov, M. Assessment by methods mathematical and physical modelling of possibility of use of the exchange scattered waves for direct detection and characteristics of systems of macrocracks. // *Seism. Technol.* 2015, 1, 22–36.
2. Schoenberg, M. Elastic Wave Behavior across Linear Slip Interfaces. // *J. Acoust. Soc. Am.* 1980, 68, 1516. Hsu, C.;
3. Schoenberg, M. Elastic Waves through a Simulated Fractured Medium. // *Geophysics* 1993, 58, 964–977.
4. Moczo, P.; Robertsson, J.O.A.; Eisner, L. Advances in Wave Propagation in Heterogeneous Earth. // *Adv. Geophys.* 2007, 48, 1–606.
5. Chaljub, E.; Komatitsch, D.; Vilotte, J.-P.; Capdeville, Y.; Valette, B.; Festa, G. Spectral element analysis in seismology. // *Adv. Geophys.* 2007, 48, 365–419.
6. Belonosov, M.; Dmitriev, M.; Kostin, V.; Neklyudov, D.; Tcheverda, V. An iterative solver for the 3D Helmholtz equation. // *J. Comput. Phys.* 2017, 345, 330–344.
7. Malovichko, M.S.; Khokhlov, N.I.; Yavich, N.B.; Zhdanov, M.S. Parallel integral equation method and algorithm for 3D seismic modelling. // In Proceedings of the 79th EAGE Conference and Exhibition, Paris, France, 12–15 June 2017.
8. Malovichko, M.S.; Khokhlov, N.I.; Yavich, N.B.; Zhdanov, M.S. Acoustic 3D modeling by the method of integral equations. // *Comput. Geosci.* 2018, 111, 223–234.
9. Kvasov, I.; Petrov, I. Numerical Modeling of Seismic Responses from Fractured Reservoirs by the Grid-Characteristic Method; Leviant, V., Ed.; Society of Exploration Geophysicists: Tulsa, OK, USA, 2019.
10. Favorskaya, A.V.; Zhdanov, M.S.; Khokhlov, N.I.; Petrov, I.B. Modelling the Wave Phenomena in Acoustic and Elastic Media with Sharp Variations of Physical Properties Using the Grid-Characteristic Method. // *Geophys. Prospect.* 2018, 66, 1485–1502.

Секция нанооптики и спектроскопии

Председатель: Л.А. Сурин (д.ф.-м.н.)

Зам. председателя: В.В. Медведев (к.ф.-м.н.)

Секретарь: А.В. Летохова

Дата: 26.11.2020 Время: 10:00

УДК 538.958

Влияние электрон-фононного взаимодействия на температурный сдвиг бесфононной линии SnV центров в алмазе

А.А. Разгулов^{1,2}, С.Г. Ляпин^{1,2}, А.П. Новиков¹, Е.А. Екимов¹.

¹ Институт физики высоких давлений им. Верещагина РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Центры окраски в алмазах привлекают все больше внимания со стороны исследователей, что связано с перспективами их практического применения, в частности, в качестве датчика температуры в оптической термометрии. В этой связи тщательное исследование низкотемпературной фотолюминесценции центров окраски в алмазе приобретает все большее значение.

Как известно [1-3], полный наблюдаемый сдвиг бесфононной линии (БФЛ) $\Delta E_{total}(T)$ складывается из двух составляющих: вклада температурного расширения решетки $\Delta E_{Latt.}(T)$ и электрон-фононного взаимодействия $\Delta E_{e-ph}(T)$ (ур. 1):

$$\Delta E_{total}(T) = \Delta E_{Latt.}(T) + \Delta E_{e-ph}(T) \quad (1)$$

Согласно модели, предложенной в [1], влияние температурного уширения решетки на сдвиг БФЛ $\Delta E_{Latt.}(T)$ может быть рассчитано следующим образом [1, 3]:

$$|\Delta E_{Latt.}(T)| = AB \int_0^T e(T) dT \quad (2)$$

где A – барический коэффициент сдвига БФЛ SnV центра в случае гидростатического давления, B – объемный модуль упругости алмаза и $e(T)$ коэффициент объемного расширения алмазной решетки [4]. Таким образом, для корректного описания вклада электрон-фононного взаимодействия $\Delta E_{e-ph}(T)$, в соответствии с ур. 1 из полного наблюдаемого сдвига $\Delta E_{total}(T)$ необходимо вычесть вклад $\Delta E_{Latt.}(T)$.

В настоящей работе была исследована фотолюминесценция ансамбля SnV центров в микрокристаллических НРНТ алмазах [5] в широком диапазоне давлений (до 9.4 ГПа) и температур (80-300К). Полученный барический коэффициент положения БФЛ SnV центра позволил впервые выделить и проанализировать вклад электрон-фононного взаимодействия $\Delta E_{e-ph}(T)$ в температурное уширение и сдвиг БФЛ SnV центра. Было установлено, что температурные зависимости как полуширины, так и сдвига БФЛ SnV центров являются нелинейными в исследованном диапазоне температур, что слабо согласуется с моделью электрон-фононного взаимодействия, основанной на фононном смешивании подуровней основного и возбужденного состояний [6, 7]. В то же время, полученные температурные зависимости для полуширины и сдвига БФЛ SnV центра находятся в хорошем согласии с моделью, основанной на квадратичном электрон-фононном взаимодействии в условиях сильного смягчения упругих постоянных в процессе электронного перехода [8], что свидетельствует о доминирующем вкладе этого механизма в температурное уширение и сдвиг БФЛ.

Работа была поддержана грантом РФФИ №. 19-12-00407.

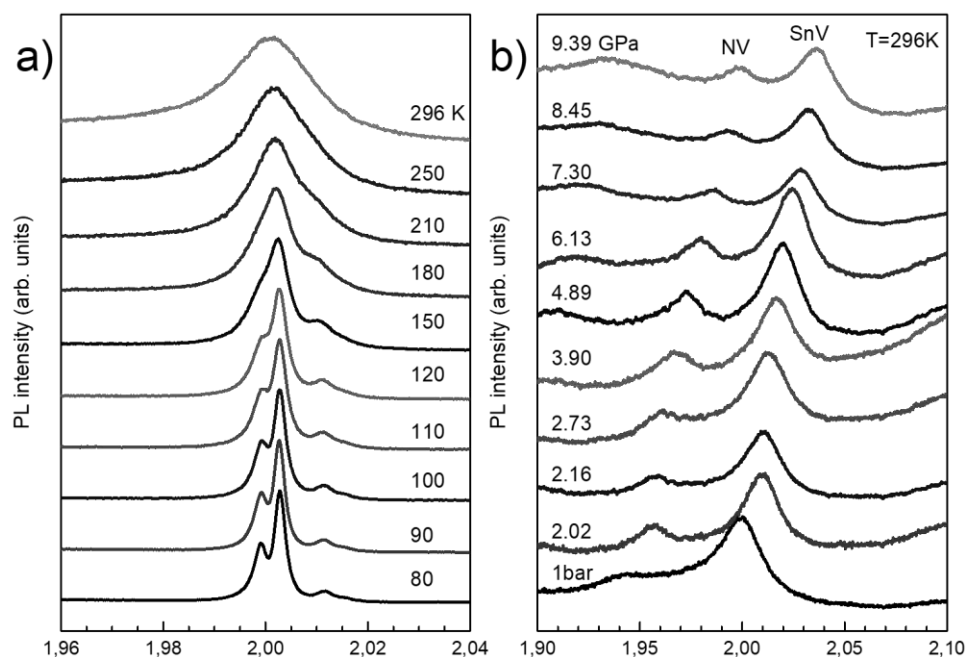


Рис.1. Эволюция бесфононной линии SnV центра от температуры (а) и давления (b).

Литература

1. Davies G., The Jahn-Teller Effect and Vibronic Coupling at Deep Levels in Diamond // Rep. Prog. Phys., 1981. V. 44, P. 787-830.
2. Doherty M.W., Acosta V.M., Jarmola A., Barson M.S.J., Manson N.B., Budker D., and Hollenberg L.C.L., Temperature shifts of the resonances of the NV-center in diamond // Phys. Rev. B, 2014. V. 90, 041201(R).
3. Neu E., Hepp C., Hauschild M., Gsell S., Fischer M., Sternschulte H., Steinmüller-Nethl D., Schreck M., and Becher C., Low-temperature investigations of single silicon vacancy colour centres in diamond // New J. Phys., 2013. V. 15, P. 043005.
4. Sato T., Ohashi K., Sudoh T., Haruna K., and Maeta H., Thermal expansion of a high purity synthetic diamond single crystal at low temperatures // Phys. Rev. B, 2002. V. 65, 092102(R).
5. Ekimov E.A., Lyapin S.G., and Kondrin M.V., Tin-vacancy color centers in micro- and polycrystalline diamonds synthesized at high pressures // Diamond Relat. Mater., 2018. V. 87, P. 223-227.
6. Fu K.-M.C., Santori C., Barclay P.E., Rogers L.J., Manson N.B., and Beausoleil R.G., Observation of the Dynamic Jahn-Teller Effect in the Excited States of Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond // Phys. Rev. Lett., 2009. V. 103, 256404.
7. Jahnke K.D., Sipahigil A., Binder J.M., Doherty M.W., Metsch M., Rogers L.J., Manson N.B., Lukin M.D., and Jelezko F., Electron-phonon processes of the silicon-vacancy centre in diamond // New J. Phys., 2015. V. 17, 043011.
8. Hizhnyakov V., Kaasik H., and Sildos I., Zero-Phonon Lines: The Effect of a Strong Softening of Elastic Springs in the Excited State // Phys. Status Solidi B, 2002. V. 234, P. 644-653.

УДК 533

Гибридные ассоциаты коллоидных квантовых точек сульфида серебра с метиленовым голубым для антимикробных покрытий

А.С. Перепелица^{1,2}, В.Ю. Иванов², А.В. Моисеенко¹, Г.П. Шуваева³

¹Воронежский государственный университет

²ООО «БНП-Солюшенс»

³Воронежский университет инженерных технологий

Исследовано антимикробное действие гибридных ассоциатов коллоидных квантовых точек (КТ) Ag₂S, пассивированных тиогликолевой кислотой, с молекулами метиленового голубого.

Результаты исследований структурных свойств коллоидных КТ выполнены с помощью стандартных методов просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) на микроскопе Libra 120 (CarlZeiss, Germany) приведены на рис. 1. Анализ ПЭМ-изображений показал формирование КТ Ag₂S средним размером 2.5 нм.

Спектры оптического поглощения приготовленных образцов исследовали с помощью спектрофотометра USB2000+ с источником излучения USB-DT (Ocean Optics, США). В спектрах оптического поглощения исследованных КТ $\text{Ag}_2\text{S/TGA}$ (рис. 2а) наблюдалась характерная особенность в районе 1.87 эВ. Формирование гибридных ассоциатов с катионами метиленового голубого (MB^+) приводит к смещению максимума поглощения молекул красителя к 662 нм (рис. 2а, кривая 2) с 654 нм для этанольного раствора MB^+ (рис. 2а, кривая 3). Для всех исследованных КТ $\text{Ag}_2\text{S/TGA}$ наблюдалась люминесценция (рис. 2б, кривая 1) с максимумом в районе 920 нм. В спектрах люминесценции гибридных ассоциатов (рис. 2а, кривая 2) наблюдается перераспределение интенсивности люминесценции компонентов. Интенсивность люминесценции КТ $\text{Ag}_2\text{S/TGA}$ снижается до 4 раз, что является следствием переноса носителей заряда от КТ к молекулам MB^+ . Стоит отметить формирование отдельной полосы с максимумом в районе 1270 нм, соответствующей флуоресценции молекул синглетного кислорода ($^1\text{O}_2$) являющимся фотодинамически активным агентом.

Исследование антимикробного действия гибридных ассоциатов КТ $\text{Ag}_2\text{S/TGA}$ с MB^+ на грамположительной бактерии *Micrococcus corallinus* и *Bacillus subtilis* (рис. 3) показало, что присутствие гибридных ассоциатов подавляет рост бактериальных клеток, ограничивая их развитие. Количество колониеобразующих единиц в чашках Петри контрольных образцов значительно превышало этот показатель в опытных образцах. В частности, для бактерий *Micrococcus corallinus* наблюдается нарушение пигментации бактерий и ограничение областей роста до нескольких отдельных участков диаметром 4-6 мм. Для бактерий рода *Bacillus subtilis* наблюдается полное подавление роста клеток, о котором можно судить по отсутствию колоний бактериальной культуры.

Таким образом, для гибридных ассоциатов коллоидных квантовых точек Ag_2S , пассивированных тиогликолевой кислотой, с катионами метиленового голубого MB^+ установлено антимикробное действие на грамположительной бактерии, что свидетельствует о возможности их применения для формирования самостерилизующихся покрытий и материалов.

Работа выполнена при поддержке Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере в рамках программы СТАРТ, договор № 3675ГС1/60577 от 31.08.2020.

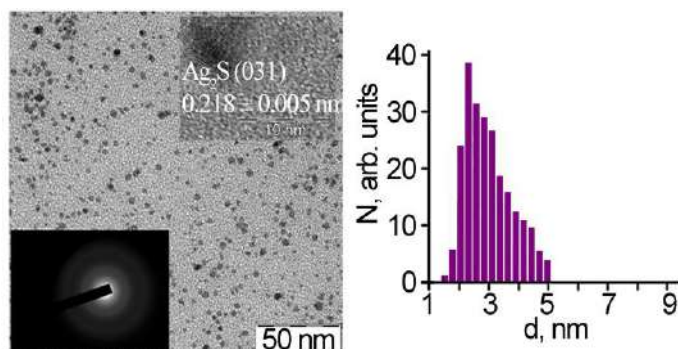


Рис. 1. ПЭМ изображения и гистограммы распределения по размеру полупроводниковых коллоидных КТ: 1 – КТ $\text{Ag}_2\text{S/TGA}$.

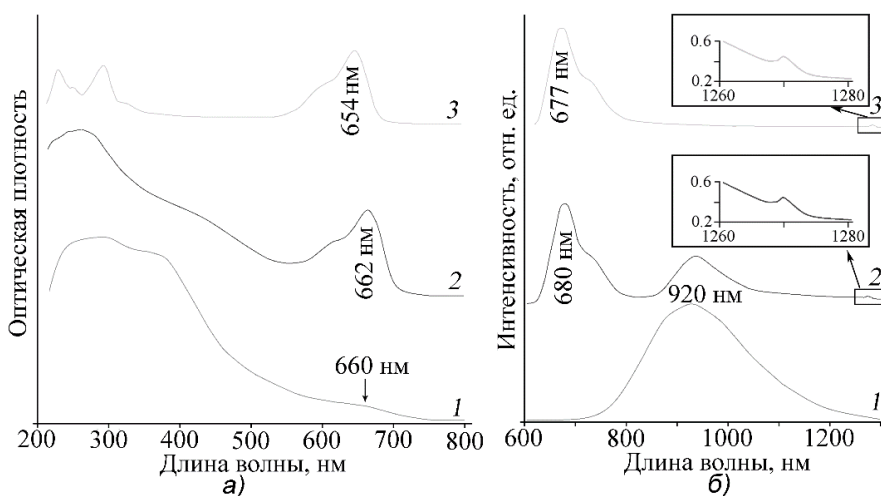


Рис. 2. Спектры оптического поглощения (а) и фотолуминесценции (б): 1 – КТ $\text{Ag}_2\text{S/TGA}$; 2 – гибридных ассоциатов КТ $\text{Ag}_2\text{S/TGA}$ с молекулами метиленового голубого; 3 – этанольного раствора метиленового голубого.

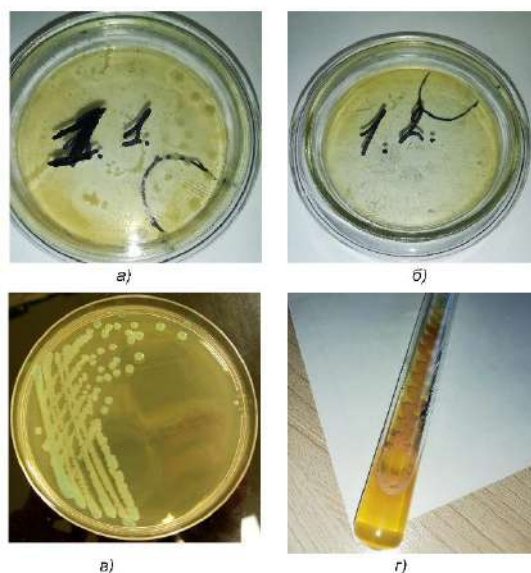


Рис. 3. Фотографии, демонстрирующие антимикробное действие коллоидных растворов гибридных ассоциатов КТ $\text{Ag}_2\text{S}/\text{TGA}$ с MB^+ на бактерии рода *Micrococcus corallinus* (а) и *Bacillus subtilis* (б) и фотографии посевов бактерий рода *Micrococcus corallinus* (в) и *Bacillus subtilis* (г) в отсутствие гибридных ассоциатов.

УДК 535-15

Исследование ИК-люминесценции центров окраски SiC-4H и SiC-6H методами спектроскопии высокого разрешения

Д.Д. Гуценко¹, К.Н. Болдырев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Институт спектроскопии РАН

Такие свойства центров окраски SiC, как спектральный диапазон фотолуминесценции (область ближнего ИК), разнообразие возможных структур, спиновые характеристики, большое время когерентности и другие, позволяют рассматривать данные центры в качестве применений в квантовой сенсорике (создание высокочувствительных датчиков магнитного, электрического полей, напряжений, давлений, температуры), квантовых вычислениях, спектроскопии одиночных фотонов и других областях [1, 2].

Работа направлена на исследование центров окраски SiC и выявление новой информации об их свойствах, выявлении возможных применений обнаруженных дефектов. Образцы политипов карбида кремния гексагональной модификации SiC-4H и SiC-6H были исследованы с помощью методов ИК-спектроскопии, таких как ИК-отражение, КРС-спектроскопия, спектроскопия поглощения и низкотемпературной люминесценции с применением фурье-спектроскопии высокого разрешения.

Был получен спектр люминесценции политипов 4H и 6H в ближней ИК-области. Проведена частичная идентификация спектральных линий люминесценции [3]. Выявлены новые чрезвычайно узкие линии. Обнаружены характерные для политипов структуры в спектрах люминесценции, подлежащие дальнейшему теоретическому и экспериментальному исследованию. Составлены схемы энергетических уровней для некоторых наблюдаемых линий SiC-4H и SiC-6H (рис. 1).

В приложении внешнего магнитного поля в SiC-4H обнаружено расщепление некоторых спектральных линий (рис. 2):

$$\Delta E = g\mu_B B \quad (1)$$

Получен спин $S = \frac{3}{2}$ и оценочное значение g-фактора выявленных центров окраски $g \approx 2$. На основе этого заключено, что, предположительно, обнаруженный центр окраски SiC является ванадиевым центром, который входит в качестве примеси при синтезе кристаллов карбида кремния и служит катализатором роста.

Полученные результаты требуют дальнейших исследований в направлении обоснования выявленных закономерностей, изучения новых спектральных линий, а также получения антипересечения линий в магнитном поле.

Работа выполнена на Уникальной Научной Установке (УНУ) ИСАН "Мультифункциональная широкодиапазонная спектроскопия высокого разрешения" (УНУ МШСВР ИСАН) при финансовой поддержке гранта РФФ № 19-72-10132.

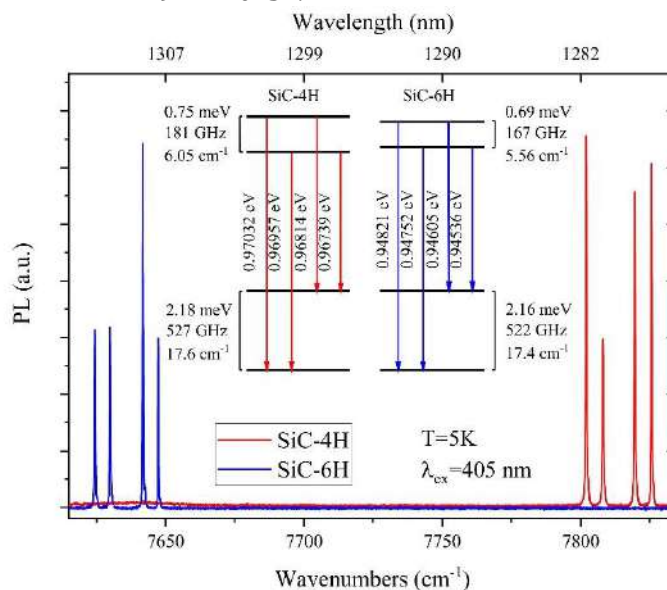


Рис.1. Наиболее интенсивные квартеты спектров люминесценции SiC-4H и SiC-6H. Схемы энергетических уровней для наблюдаемых спектральных линий.

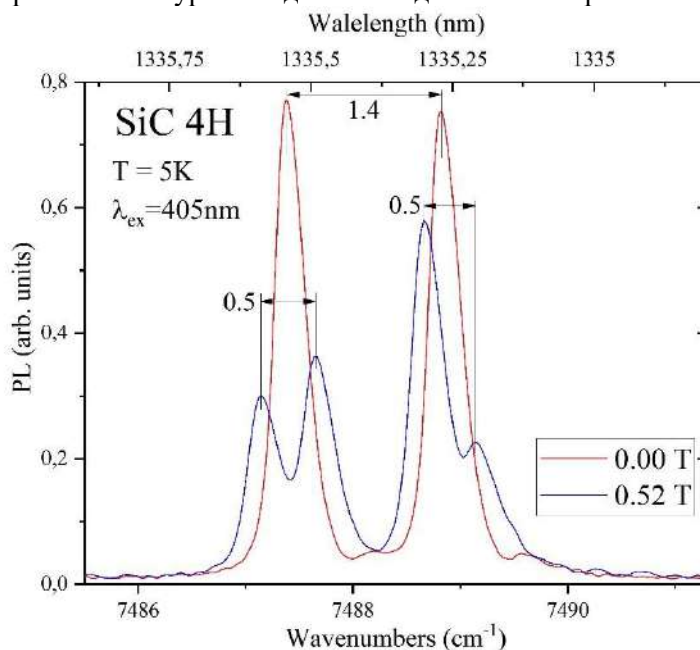


Рис.2. Линии люминесценции монокристалла SiC-4H в отсутствии внешнего магнитного поля и в поле магнита 0,52 Тл.

Литература

- Kraus H., Soltamov V., Fuchs F. [et al.] Magnetic field and temperature sensing with atomic-scale spin defects in silicon carbide. // Sci Rep 4, 5303 (2015).
- Soltamov V.A., Tolmachev D.O., Il'in I.V. [et al.] Point defects in silicon carbide as a promising basis for spectroscopy of single defects with controllable quantum states at room temperature. // Phys. Solid State 57, 891–899 (2015).
- Болдырев К.Н., Гуценко Д.Д., Климин С.А. [и др.]. Новые линии в спектрах ИК люминесценции высокого разрешения монокристаллов SiC политипов 4H и 6H. // Оптика и спектроскопия 128 (9), 1264–1268 (2020).

Квантовая электронная плазма и поглощение Е-волны в металлической пленке

Н.В. Зверев

Московский государственный областной университет

В настоящее время вследствие бурного развития физики био- и нанотехнологий большой интерес представляют исследования взаимодействия электромагнитного излучения с тонкими проводящими объектами. В данной работе исследуется поглощение электромагнитных Е-волн (вектор Е волны лежит в плоскости падения волны) в тонкой металлической пленке.

Пусть на металлическую пленку толщиной d , расположенную между двумя прозрачными средами с диэлектрическими проницаемостями ε_1 и ε_2 , со стороны среды с ε_1 падает Е-волна под углом падения θ . Тогда энергетический коэффициент поглощения волны A , выражаемый через коэффициенты отражения и прохождения волны R и T , имеет вид [1]:

$$A = 1 - R - T, \quad R = \left| \frac{U^{(1)} + U^{(2)}}{V^{(1)} + V^{(2)}} \right|^2, \quad T = \left| \frac{U^{(1)}V^{(2)} - U^{(2)}V^{(1)}}{V^{(1)} + V^{(2)}} \right|^2 \operatorname{Re} \left(\frac{\cos \theta'}{\cos \theta} \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}} \right). \quad (1)$$

В этой формуле θ' – угол преломления волны в среду с ε_2 , и обозначены величины

$$U^{(j)} = \frac{\cos \theta - Z_E^{(j)} \sqrt{\varepsilon_1}}{\cos \theta + Z_E^{(j)} \sqrt{\varepsilon_2}}, \quad V^{(j)} = \frac{\cos \theta + Z_E^{(j)} \sqrt{\varepsilon_1}}{\cos \theta + Z_E^{(j)} \sqrt{\varepsilon_2}} \quad (j = 1, 2), \quad (2)$$

где $Z_E^{(j)}$ – импеданс Е-волны на поверхности металлической пленки. Данный импеданс вычислен в [2] в предположении зеркального отражения электронов проводимости от поверхности пленки:

$$Z_E^{(j)} = \frac{2i c \omega}{d} \sum_n \frac{1}{k_n^2} \left(\frac{k_x^2}{\omega^2 \varepsilon_l(\omega, k_n)} + \frac{(\pi n / d)^2}{\omega^2 \varepsilon_{tr}(\omega, k_n) - (c k_n)^2} \right). \quad (3)$$

Здесь ω – циклическая частота волны, c – скорость света, $\varepsilon_l(\omega, k)$ и $\varepsilon_{tr}(\omega, k)$ – продольная и поперечная диэлектрические проницаемости электронной плазмы, а также

$$k_n = \sqrt{(\pi n / d)^2 + k_x^2}, \quad k_x = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_1} \sin \theta, \quad (4)$$

и суммирование выполняется по всем нечетным $n = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots$ при $j = 1$ и по всем четным $n = 0, \pm 2, \pm 4, \dots$ при $j = 2$.

Нами взяты для исследования диэлектрические проницаемости квантовой вырожденной электронной плазмы при 0 К, равные [3, 4]:

$$\varepsilon_l^{(qu)}(\omega, k) = 1 + \frac{3}{4Q^2} \frac{(\Omega + i\gamma)F(\Omega + i\gamma, Q)F(0, Q)}{\Omega F(0, Q) + i\gamma F(\Omega + i\gamma, Q)}, \quad (5)$$

$$\varepsilon_{tr}^{(qu)}(\omega, k) = 1 - \frac{1}{\Omega^2} \left(1 + \frac{\Omega G(\Omega + i\gamma, Q) + i\gamma G(0, Q)}{\Omega + i\gamma} \right), \quad (6)$$

где функции $F(\Omega + i\gamma, Q)$ и $G(\Omega + i\gamma, Q)$ зависят от безразмерных величин:

$$\Omega = \frac{\omega}{\omega_p}, \quad Q = \frac{v_F k}{\omega_p}, \quad \gamma = \frac{1}{\omega_p \tau}, \quad r = \frac{\hbar \omega_p}{m_e v_F^2}. \quad (7)$$

Здесь ω_p – плазменная частота электронной плазмы, v_F – скорость Ферми электронов, τ – время релаксации электронов вследствие их столкновений в плазме, $\hbar$ – постоянная Планка, m_e – эффективная масса электронов проводимости. Диэлектрические проницаемости $\varepsilon_l^{(qu)}(\omega, k)$ и $\varepsilon_{tr}^{(qu)}(\omega, k)$ учитывают как кинетические, так и квантовые волновые свойства электронов плазмы.

Результаты для квантовой вырожденной электронной плазмы сравниваем с результатами для классической вырожденной электронной плазмы с проницаемостями $\varepsilon_l^{(cl)}(\omega, k)$ и $\varepsilon_{tr}^{(cl)}(\omega, k)$ [5] без учета квантовых волновых свойств электронов, а также с результатами для классического электронного газа с проницаемостями [2, 5]:

$$\varepsilon_l^{(DL)}(\omega, k) = \varepsilon_{tr}^{(DL)}(\omega, k) = 1 - \frac{1}{\Omega(\Omega + i\gamma)}.$$

Эти проницаемости не учитывают ни квантовые, ни кинетические свойства электронов плазмы.

Мы рассматриваем пленку, толщина d которой удовлетворяет условию $\lambda_B \ll d < \delta$, где $\lambda_B = \frac{\hbar}{m_e v_F}$ – длина волны де Бройля электронов проводимости и $\delta = \frac{c}{\omega_p}$ – толщина скин-слоя металла. В качестве металла пленки нами выбран алюминий, имеющий следующие параметры [2]: $\omega_p = 1.93 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$, $v_F = 1.34 \cdot 10^6 \text{ м/с}$, $m_e = 1.35 \cdot 10^{-30} \text{ кг}$, а время релаксации $\tau = 10^3 / \omega_p$. Считаем, что пленка расположена на кварцевой подложке с $\varepsilon_2 = 2$, а Е-волна падает на пленку из вакуума или воздуха с $\varepsilon_1 = 1$. Рассматриваемые нами частоты излучения ω не превосходят плазменную частоту ω_p .

Численные расчёты коэффициента поглощения A , выполненные по формулам (1) – (7), показывают отличие результатов для квантовой вырожденной электронной плазмы как от результатов для классической вырожденной плазмы, так и от результатов для классического электронного газа (рис. 1). При этом коэффициенты поглощения классической вырожденной плазмы и классического электронного газа практически совпадают при частотах $\omega \leq 0.15 \omega_p$.

Таким образом, показано влияние как кинетических, так и квантовых волновых свойств электронов проводимости на поглощение Е-волн в тонкой металлической пленке. Это следует учитывать при создании и использовании устройств в электронике и в оптике, содержащих тонкие металлические слои.

Автор благодарен проф. Юшканову А.А., без поддержки и советов которого были бы невозможны эти исследования. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-07-00537 А.

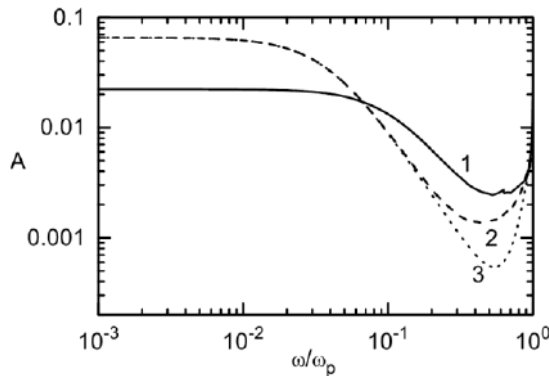


Рис.1. Зависимость коэффициента поглощения A от частоты ω : 1 – квантовая вырожденная электронная плазма; 2 – классическая вырожденная электронная плазма; 3 – классический электронный газ.

Величины $d = 3.5 \text{ нм}$, $\theta = 75^\circ$, $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 2$, $\omega_p = 1.93 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$.

Литература

1. Yushmanov A.A. and Zverev N.V. Quantum Electron Plasma, Visible and Ultraviolet P-wave and Thin Metallic Film /
2. Fuchs R. and Kliewer K.L. Optical Properties of an Electron Gas: Further Studies of a Nonlocal Description // Phys. Rev. 1969. V. 185. No. 3. P. 905.
3. Ятышев А.В., Юшканов А.А. Поперечная электрическая проводимость квантовой столкновительной плазмы в подходе Мермина // Теор. и Матем. Физ. 2013. Т. 175. № 1. С. 132.
4. Ятышев А.В., Юшканов А.А. Продольная электрическая проводимость в квантовой плазме с переменной частотой столкновений в рамках подхода Мермина // Теор. и Матем. Физ. 2014. Т. 178. № 1. С. 147.
5. Александров А.Ф., Богданкевич Л.С., Рухадзе А.А. Основы электродинамики плазмы: Учебное пособие для вузов. М.: Высшая школа, 1978. 407 с.

Композитные наноструктуры Au@SiNWs для молекулярной сенсорики с использованием спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния света

А.Д. Карташова¹, Е.А. Алексеева¹, И. В. Божьев¹, К.А. Гончар¹, Л.А. Осминкина^{1,2}

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²Институт биологического приборостроения РАН

Кремниевые наноструктуры, благодаря доступным и воспроизводимым методикам их получения, активно используются в настоящее время в качестве подложек для формирования наноструктур металлов различных морфологий. Такие структуры показано могут использоваться качестве сенсоров, работающих на эффекте гигантского комбинационного рассеяния света (ГКР). Использование ГКР-активных композитных наноматериалов кремний-золото/серебро, позволяет усиливать сигнал комбинационного (Рамановского) рассеяния света адсорбированных на них молекул в 10^6 - 10^8 раз [1-3].

В данной работе подложки кремниевых нанонитей (SiNWs) использовались как матрица для получения металлических Au наноструктур заданной морфологии. SiNWs были получены методом металл-стимулированного химического травления пластин кристаллического кремния. Наночастицы Au получали восстановлением из раствора AuCl_3 , как описано в работах [1-3].

Структурные свойства полученных подложек Au@ SiNWs были исследованы с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) Carl Zeiss ULTRA 55 FE-SEM. Свойства усиления сигнала КРС исследовались на конфокальном микро-спектрометре ConfotecTM MR350.

На рисунке 1. представлена микрофотография СЭМ полученного образца Au@SiNWs, на которой отчетливо видны кремниевые нанонити, декорированные сферическими наночастицы Au, размером около 20 нм. Образцы Au@КНН были использованы для детектирования сигнала ГКРС 4-меркаптопиридина (4-МПу) различных концентраций (см данные на рис. 2). Продемонстрирована возможность обнаружения молекул 4-МПу вплоть до концентрации $9 \cdot 10^{-8}$ М (рис.2).

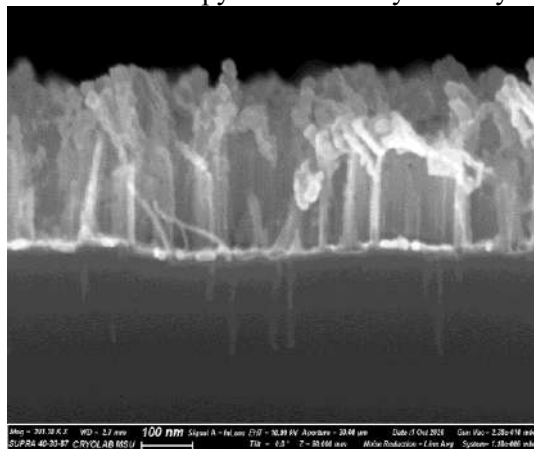


Рис.1. Микрофотография СЭМ подложки Au@SiNWs (вид сбоку).

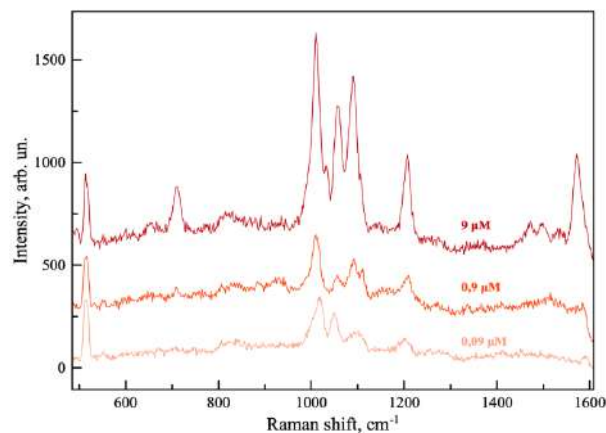


Рис.2. ГКР-спектры молекул 4-МПу различных концентраций, адсорбированных на Au@SiNWs.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-12-00297.

Литература

1. *Agafilushkina, S.N.; Žukovskaja, O.; Dyakov, S.A.; Weber, K.; Sivakov, V.; Popp, J.; Cialla-May, D.; Osminkina, L.A.* Raman Signal Enhancement Tunable by Gold-Covered Porous Silicon Films with Different Morphology. *Sensors* 2020, 20, 5634.
2. *Zukovskaja, O., Agafilushkina, S., Sivakov, V. et. al.* Rapid detection of the bacterial biomarker pyocyanin in artificial sputum using a SERS-active silicon nanowire matrix covered by bimetallic noble metal nanoparticles. *Talanta*. 2019, 202, 171-177.
3. *Osminkina, L.A., Zukovskaja, O., Agafilushkina, S.N et. al.* Gold nanoflowers grown in a porous Si/SiO₂ matrix: The fabrication process and plasmonic properties. *Appl. Surf. Sci.* 2020, 507.

Компьютерное микрофотометрирование фотографических спектров люминесценции*С.Г. Стоюхин, В.А. Евстропов, В.А. Никитенко*

Российский университет транспорта (РУТ (МИИТ))

Известно, что изучение спектров излучения имеет большое значение для выявления природы дефектов в полупроводниках и для построения их генерационно-рекомбинационных моделей люминесценции. Без этого невозможно создание конкретных полупроводниковых устройств

Спектры люминесценции, снятые по фотографической методике уникальны и обладают большой информативностью и наглядностью. Типичный «фотографический» спектр включает фактически, две фотографии, сделанные одна за другой на одном и том же спектральном приборе. Их изображения представлены на рисунке 1. Один (верхний) – это исследуемый спектр, а другой (нижний) – это эталонный дуговой спектр железа.

Длины волн узких линий эталонного спектра известны с высокой точностью до значений в пикометрах. Сравнивая их положение с положением линий в спектрах образцов можно определить соответствующие длины волн. Как правило, вручную, это делается с помощью линейной интерполяции.

Для выяснения зависимости интенсивности от длины волны учитывается, что интенсивность свечения пропорциональна почернению пленки. Для обработки пленок обычно используется микрофотометр. В нем луч света просвечивал пленку, которая равномерно передвигалась под лучом. Проходящий свет попадал на фотоприемник, сигнал с которого через преобразователь подается на самописец. Эта процедура была довольно трудоемкой. Приходилось сканировать еще и эталонный спектр, а затем вручную строить нужную зависимость по точкам, сопоставляя полученные зависимости.

Целью нашего исследования было создание компьютерной программы для обработки спектров, полученных по фотографической методике. Она разрабатывалась для расшифровки спектров и представления их в виде зависимости интенсивности свечения от длины волны. В качестве исходного материала использовались спектры фотолюминесценции монокристаллов CuI, снятые при температуре жидкого гелия $T=4,2$ К. Данный материал перспективен для создания различных оптоэлектронных приборов и вызывает международный интерес [1]. Большое количество этих спектров снято нами ранее в лаборатории «Оптика твердого тела» Санкт - Петербургского государственного университета, и именно они использовались для построения моделей люминесценции этих уникальных кристаллов [2-3]. Однако из-за трудоемкости процедуры обработки удалось построить графики только для небольшой части спектров, остальное положено в архив.

Разрабатываемая компьютеризованная процедура состояла в следующем. Спектр, предварительно оцифрованный с помощью слайд - модуля на сканере Epson Perfection V600 Photo, обрабатывался на компьютере. Мы назвали этот процесс **компьютерным микрофотометрированием**. По эталонному спектру была построена зависимость номера пикселя в изображении от длины волны. Затем программа сканировала полосой с шириной в 1 пиксель и высотой до 100 пикселей вдоль исследуемого спектра. Количество пикселей в полосе может варьироваться. Усредненные значения почернения в каждом пикселе вдоль спектра принимаются за интенсивность люминесценции.

Программа имеет целый ряд необходимых сервисов. Удалось предусмотреть возможность изменения масштаба, как по шкале длин волн, то есть по горизонтальной оси, так и по шкале интенсивностей, то есть по вертикальной оси. Кроме того, можно выбрать любую длину волны в спектре в качестве начальной в сканировании.

Предусмотрена удобная возможность для определения длин волн соответствующих линий в спектре. При подведении «мышки» к линии и нажатии клавиши длина волны представляется на графике автоматически без кропотливых расчетов. Причем ориентация надписи можно менять по необходимости, что очень удобно.

Программа написана на языке программирования Python 3.8.2. Ее совершенствование и насыщение различными сервисами продолжается.

За счет корректной математической обработки удалось существенно уменьшить уровень шумов обычно присутствовавших на изображениях спектров. В фотоэлектрической методике они определялись особенностями работы электроники. В фотографической методике они связаны со случайным характером проявления так называемых «зерен» фотоэмульсии.

На рисунке 1 представлен полученный в результате спектр фотолюминесценции и под ним исходный исследуемый фотографический спектр вместе с эталонным спектром. Сравнивая их можно видеть, что практически все линии люминесценции, видимые на фотопленке, определяются на зависимости относительной интенсивности свечения от длины волны. Характер амплитуд линий свечения тоже находится в хорошем соответствии с фотографиями спектров.

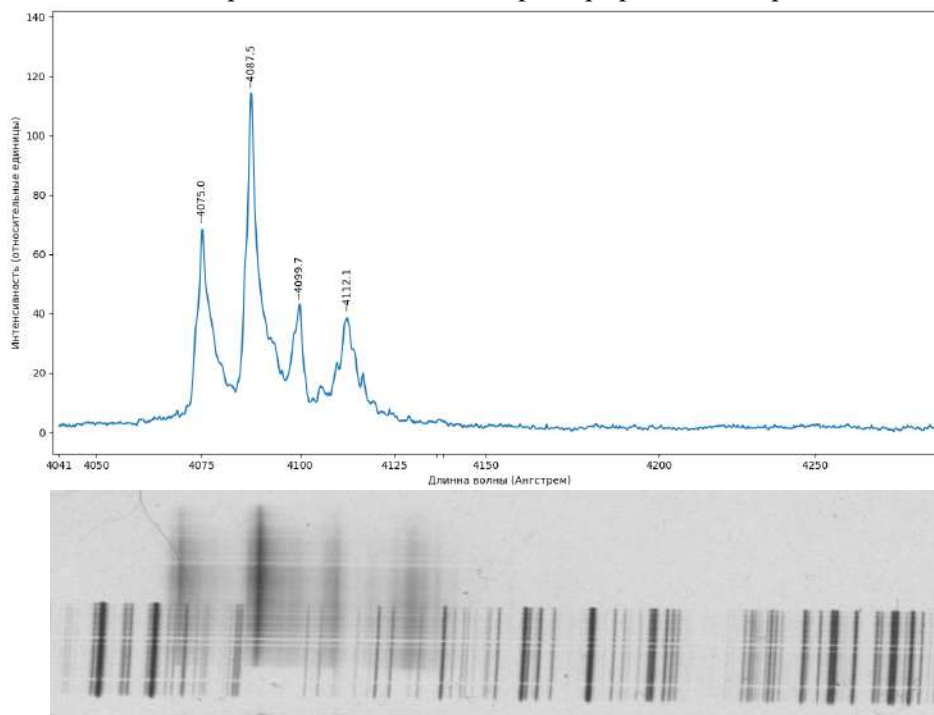


Рис.1. Пример компьютерного построения фотографического спектра фотолюминесценции.

Всего было построено порядка 300 графиков для различных образцов и получены уникальные результаты.

Следует особо отметить, что разрабатываемая технология обработки спектров фотопленок носит оригинальный характер и сможет найти применение при анализе результатов, полученных во многих лабораториях и научных группах задолго до появления компьютеров, так как фотографическая методика исследований спектров люминесценции появилась гораздо раньше фотоэлектрической, и некоторые проделанные когда-то измерения просто невозможно повторить. С помощью разрабатываемой нами программы их можно будет реанимировать и проанализировать на современном уровне. Надеемся, что это будет способствовать получению новых фундаментальных результатов.

Литература

1. Grundmann M., Schein F.-L., Lorenz M., Böntgen T., Lenzner J., Von Wenckstern H. Cuprous iodide - a p-type transparent semiconductor: history and novel applications // *Physica Status Solidi. A: Applications and Materials Science*. 2013. V. 210. № 9. P. 1671-1703.
2. Vereschagin I.K., Nikitenko V.A., Stoyukhin S.G. Band-Edge Emission in CuI Singl Cristals // *Journal of Luminescence*, 1984, v.29, p.215-221.
3. Никитенко В. А., Стоюхин С. Г., Кокин С. М. Красно-оранжевая люминесценция нелегированных кристаллов иодида меди в интервале температур 80-300 К. // *Журнал прикладной спектроскопии*. 2019. Т. 86, № 5, с.739-745.

Методы спектроскопии комбинационного рассеяния света и оптической микроскопии для мониторинга процесса растворения наночастиц пористого кремния в модельных жидкостях и живых клетках

Д.Е. Максимова¹, У.А. Цурикова¹, М.Б. Гонгальский¹, Я.В. Евстратова^{1,2}, А.А. Кудрявцев^{1,2}, Л.А. Осминкина^{1,3}

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН

³Институт биологического приборостроения РАН

В настоящее время наночастицы на основе различных органических и неорганических материалов находят применение в медицине в качестве наноконтейнеров для доставки лекарств. Особое внимание уделяется наночастицам на основе пористого кремния (КНЧ), которые сочетают в себе преимущества использования твердотельных пористых материалов со свойствами низкой токсичности и биodeградируемости [1-4].

В данной работе изучена динамика растворения КНЧ, как показано, состоящих из нанокристаллов кремния (нк-Si), в модельной жидкости на примере натрий-фосфатного буфера (PBS) (в диализном мешке), и в живых клетках 3Т3 NIH и ВТ474 с помощью таких оптических методов, как микро-спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС), и люминесцентная микроскопия.

Водные суспензии КНЧ были получены измельчением массивов пористых нанонитей кремния, которые в свою очередь получались методом металл-стимулированного химического травления.

Были изучены структурные свойства наночастиц с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) (см. рис. 1а). Показано, что КНЧ имеют пористую структуру и диаметр <90 нм. Наличие ярких колец в дифракционной картине (см вставку рис.1а) указывает на то, что наночастицы представляют собой агломераты мелких нк-Si.

Методом КРС изучены процессы растворения нк-Si при их инкубации в PBS при температуре 37°C и с клетками карциномы груди человека ВТ474. Показано, что при инкубации КНЧ в течении 1-24 часов в PBS в их спектрах КРС, по сравнению с начальным спектром, наблюдается низкочастотный сдвиг максимума, появление сигнала от аморфной фазы кремния, падение интенсивности, а затем и полное исчезновение сигнала, что свидетельствует об уменьшении размеров, а затем и полном растворении нк-Si (см. рис. 1б). Размер нк-Si рассчитывался из положения максимума в спектре КРС формуле [5,6]:

$$D = 0.543 \left(\frac{52.3}{\Delta\omega} \right)^{0.63}, \quad (1)$$

где $\Delta\omega$ - сдвиг максимума спектра КРС КНЧ относительно 520,5 см⁻¹ (максимум сигнала КРС кристаллического кремния). Рассчитанный по формуле (1) размер нк-Si после одного часа инкубации составлял 4,6 нм, а после 6 часов – 3,6 нм.

Исследовалось растворение КНЧ *in vitro* в клетках 3Т3 NIH с использованием метода конфокальной люминесцентной микроскопии. Показана локализация наночастиц на мембране клеток 3Т3 NIH после 4 часов инкубации и их локализация в цитоплазме и частичное растворение после 43 часов инкубации с клетками, о чем свидетельствовало тушение фотолюминесценции нк-Si (см. рис. 2(1)). Вместе с тем, при инкубации с клетками ВТ474, наночастицы в первые 6 часов локализуются преимущественно на клеточной мембране. После 24 часов инкубации с клетками, КНЧ локализуются преимущественно на периферии ядер клеток, при этом происходит низкочастотный сдвиг максимума сигнала КРС, появление аморфной кремниевой фазы, падение интенсивности сигнала, что указывает на биodeградацию нк-Si (см. рис. 2(2)). Полученные результаты перспективны для разработки биodeградируемых систем доставки лекарств на основе пористых кремниевых наночастиц.

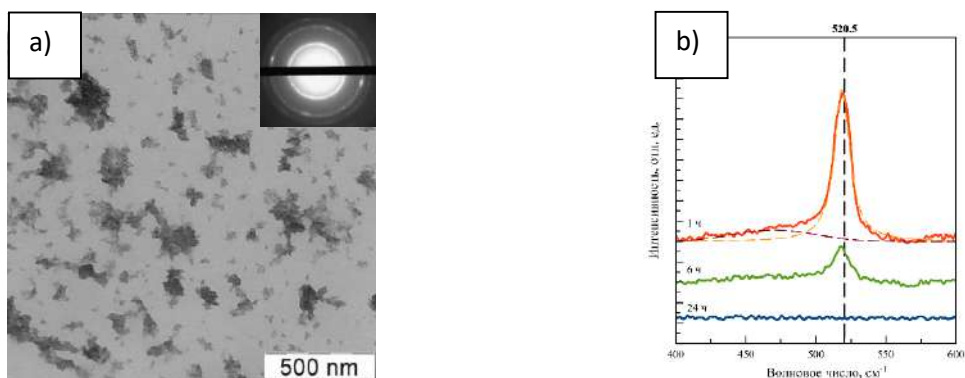


Рис. 1 а) микрофотография КНЧ, полученная с помощью ПЭМ, в левом верхнем углу представлена дифракционная картина электронов от наночастиц; б) Спектры КРС КНЧ при их инкубации в PBS 37°C в течение 1, 6, 24 часов (штрихованными линиями представлена деконволюция спектра КРС КНЧ после одного часа инкубации в PBS).

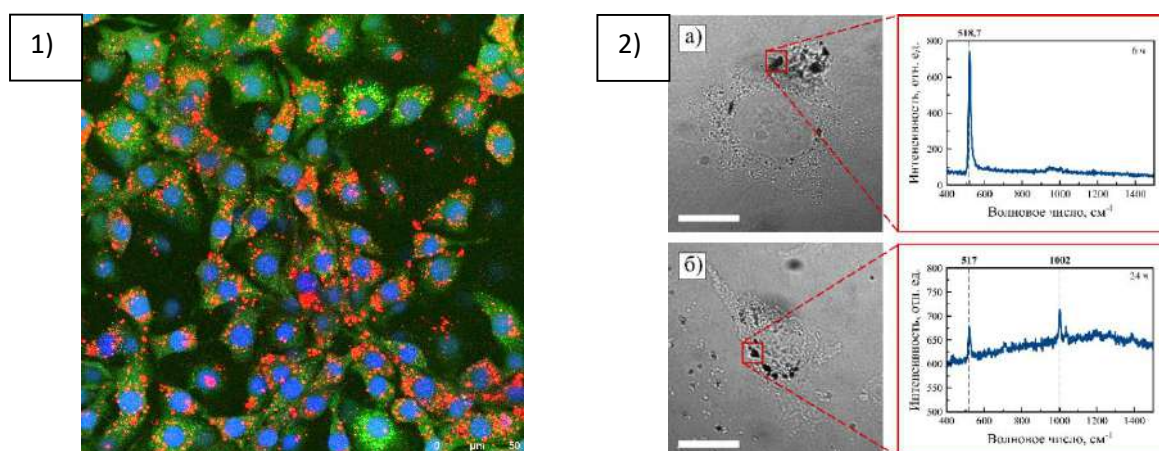


Рис. 2 1) конфокальная микроскопия клеток 3Т3 N1Н после инкубации 24 часа с КНЧ (наночастицы видны как яркие красные точки); 2) оптические микрофотографии клеток BT474 с КНЧ (черные точки) и спектры КРС КНЧ при их инкубации с клетками в течение 6 (а) и 24 (б) часов. Красными квадратами обведены КНЧ, из которых были получены соответствующие сигналы КРС. Шкала на микрофотографиях слева равна 10 μm .

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90122, и РНФ № 19-72-10131.

Литература

1. Anderson S.H.C., Elliott H., Wallis D.J., Canham L.T., Powell J.J. Dissolution of different forms of partially porous silicon wafers under simulated physiological conditions // *Physica Status Solidi (A)*. 2003. V. 197. N. 2. P. 331-335.
2. Park J.H., Gu L., Von Maltzahn G., Ruoslahti E., Bhatia S.N., Sailor M.J. Biodegradable luminescent porous silicon nanoparticles for in vivo applications // *Nature Mater.* 2009. V. 8. N. 4. P. 331-336.
3. Gongalsky M., Tsurikova U.A., Storey C.J., Evstratova Y.V., Kudryavtsev A., Canham L.T., Osminkina L.A. The effects of drying technique and surface pre-treatment on the cytotoxicity and dissolution rate of luminescent porous silicon quantum dots in model fluids and living cells // *Faraday Discussions*. 2020. V. 222. P. 318-331.
4. Tolstik E., Osminkina L.A., Matthäus C., Burkhardt M., Tsurikov K.E., Natashina U.A., Timoshenko V.Y., Heintzmänn R., Popp J., Sivakov V. Studies of silicon nanoparticles uptake and biodegradation in cancer cells by Raman spectroscopy // *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine*. 2016. V. 12. N. 7. P. 1931-1940.
5. Paillard V., Puech P., Laguna M.A., Carles R., Kohn B., Huisken F. Improved one-phonon confinement model for an accurate size determination of silicon nanocrystals // *Journal of Applied Physics*. 1999. V. 86 N. 4. P. 1921-1924.
6. Zi J., Zhang K., Xie X. Comparison of models for Raman spectra of Si nanocrystals // *Physical Review B*. 1997. V. 55. N. 15. P. 9263.

Микроструктура лазерной керамики Yb:LuAG - возможности метода комбинационного рассеяния света

К.Н. Белов¹, Л.И. Дёмина¹, М.Г. Иванов², Н.Д. Кундикова^{1,2}

¹Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)

²Институт электрофизики УрО РАН

Эффективность генерации лазерного излучения в оптической керамике зависит от дефектов и от технологического процесса на разных этапах её синтеза. Светорассеяние в лазерной керамике зависит от среднего размера зерна поликристаллической структуры. Размер кристаллитов зависит от технологии изготовления керамики.

Один из методов определения микроструктуры оптической керамики – метод комбинационного рассеяния света. Метод был предложен в работе для исследования лазерной керамики алюмо-иттриевого граната, допированного ионами неодима (1at%Nd:YAG).

Цель настоящей работы – определение структуры лазерной керамики алюмо-лютециевого граната, допированного ионами иттербия (3at%Yb:LuAG).

Лазерная керамика Yb:LuAG обладает некоторыми преимуществами, в том числе более высокой теплопроводностью, по сравнению с керамикой Nd:YAG. Спектры комбинационного рассеяния регистрировались на спектрометре комбинационного рассеяния ЗНЛ ИНТЕГРА СПЕКТРА в спектральном диапазоне 300-500 см⁻¹ на длине волны 633 нм.

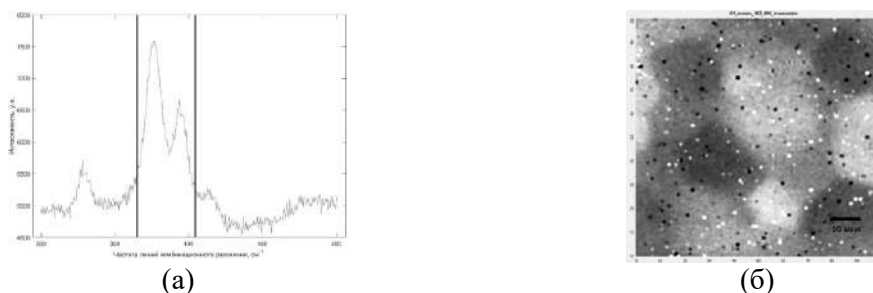


Рис.1. Спектры комбинационного рассеяния керамики 3at%Yb:LuAG: (а) локальный спектр в диапазоне от 300см⁻¹ до 500 см⁻¹, (б) изображение, полученное после анализа пиков по значениям центра-масс интенсивности в спектрах комбинационного рассеяния поверхности 3at%Yb:LuAG размером 85*85 мкм

На рис.1 (а) представлен спектр комбинационного рассеяния керамики 3at%Yb:LuAG. Вертикальными линиями выделен спектральный диапазон от 365 см⁻¹ до 405 см⁻¹. В этом диапазоне располагаются два пика, которые нужно анализировать по значениям центра-масс интенсивности после получения множества спектров на заданной поверхности.

Пространственное распределения интенсивности было получено на четырёх участках поверхности исследуемого образца. На рис.1 (б) изображено одно из четырёх пространственных зависимостей значения центра-масс интенсивности рассматриваемых двух пиков. Контрастные пятна, наблюдаемые на рисунке, соответствуют разным зёрнам и воспроизводят поликристаллическую структуру лазерной керамики. Проявление светлых и тёмных пятен связано с различными значениями центра-масс интенсивности указанных пиков в спектрах комбинационного рассеяния, полученных на поверхностях разных зёрен.

Таким образом, методом комбинационного рассеяния показано, что средний размер зёрен лазерной керамики 3at%Yb:LuAG составляет примерно 20 мкм.

Литература

1. Ramirez MO. et al.—Opt. Express. 2008. Vol. 16. №9. P.5965.

Многоканальный гетеродинный спектрометр для контроля уровня содержания парниковых газов в атмосфере Земли

С.Г. Зеневич^{1,2}, Д.В. Чурбанов¹, И.Ш. Газизов^{1,2}, М.В. Спиридонов^{1,3}, А.В. Родин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт космических исследований РАН

³Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Дистанционное зондирование атмосферы Земли с высоким спектральным разрешением является важной научной задачей. Данные зондирования используются во многих отраслях деятельности человека: в моделировании климата, контроле качества окружающей среды и прогнозе погоды. На сегодняшний день методы дистанционного зондирования, дающие точную информацию о структуре и динамике верхних слоев атмосферы, не получили широкого распространения в том числе и из-за экономической нецелесообразности, связанной с высокой стоимостью измерительного оборудования. Однако гетеродинная спектроскопия открывает возможности создания компактных спектрометров, сохраняя при этом сверхвысокое спектральное разрешение, позволяющее изучать не только структуру атмосферы, но и её динамику. Данная работа посвящена описанию проекта недорогого и компактного многоканального лазерного гетеродинного спектрометра для исследования атмосферы Земли.

Аппарат в режиме солнечных затмений в ближнем ИК диапазоне способен измерять следующие характеристики: интегральные концентрации CO₂ и CH₄, их вертикальное распределения, а также проекции скорости ветра, измеренной вдоль направления наблюдения Солнца. Ранее нами было заявлено о подтверждении концепции многоканальности на основе двухканального гетеродинного спектрометра [1]. На сегодняшний день нашей группой впервые реализована концепция многоканальности гетеродинного приемника (4 канала), которая позволяет измерять спектры с соотношением сигнал/шум 300-500 за 2 минуты накопления, сохраняя при этом высокое спектральное разрешение $\lambda/\delta\lambda \sim 10^7$, позволяющее измерять профиль отдельной вращательной линии колебательного спектра. Использование оптоволокон и лазеров, широко используемых в телекоммуникациях, позволяет значительно сократить стоимость, габариты и массу измерительного оборудования.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 19-32-90276 (Зеневич С.Г.)) и (№ 19-29-06104 (Родин А.В., Газизов И.Ш., Спиридонов М.В.)).

Литература

1. Zenevich S. et al. The improvement of dark signal evaluation and signal-to-noise ratio of multichannel receivers in NIR heterodyne spectroscopy application for simultaneous CO₂ and CH₄ atmospheric measurements // OSA Continuum. 2020. V. 3. N. 7. P. 1801-1810.

Моделирование дисперсного нелинейного показателя преломления методом FDTD

С.С. Моритака^{1,2}, А.Д. Кондорский², В.С. Лебедев²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Моделирование оптических свойств наноматериалов и наноструктур является важной и актуальной задачей современной нанофотоники. Эффективные аналитические методы развиты только для сравнительно простых геометрий, таких как шары со сферическими оболочками и сфероиды. В большинстве случаев теоретическое рассмотрение производится с помощью компьютерного моделирования. Одним из наиболее распространённых методов является FDTD [1]. До настоящего времени были сделаны разносторонние исследования металлических наночастиц и гибридных частиц, состоящих из металла и диэлектрика, причём различных форм. Область теоретического исследования нелинейных свойств таких частиц развита значительно слабее. В частности, не производились

расчёты наночастиц в широких частотных диапазонах, содержащих вещества с дисперсией керровской нелинейностью. Вместе с тем существуют программные инструменты, дополняющие стандартные алгоритмы метода FDTD прямым расчётом эволюции поляризации дисперсных материалов, моделируемых как многоуровневые системы с оптическими дипольными переходами. Эти инструменты ранее применялись к расчетам лазеров.

В настоящей работе предложен подход, позволяющий распространить применение этих инструментов на моделирование керровской нелинейности. Для этого была использована имеющаяся в пакете МЕЕР [2] реализация описания взаимодействия света с многоуровневой квантовой системой. Проведен анализ экспериментальных данных по плёнкам J-агрегата красителя PIC [3], и из этих данных извлечены параметры многоуровневой модели, используемой для численного описания нелинейной восприимчивости в рамках уравнений сильной связи для матрицы плотности [4]. Проведено сравнение имеющихся экспериментальных данных по дисперсии нелинейной восприимчивости третьего порядка с известными решениями уравнений сильной связи [4] и подтверждено количественное согласие наших теоретических данных с экспериментом.

Для численного расчёта нелинейного показателя преломления и поглощения в плёнке J-агрегата были написаны две программы на языке Python, основывающиеся на пакете МЕЕР. В обоих случаях рассматривалось нормальное падение гауссова импульса на плёнку толщиной 50 нм в пустом пространстве. Моделирование производилось в одномерной ячейке с отступами от плёнки по 1 микрону в обе стороны. В качестве границы ячейки использовался PML толщиной 1 микрон. Измерения проводились в диапазоне длин волн от 573 нм до 577 нм. Вместо того, чтобы исследовать каждую точку дисперсионной кривой отдельным импульсом с узким спектром, как это делалось в реальных экспериментах, вся область была накрыта одним импульсом с достаточно широким спектром. Это было сделано в целях сокращения суммарной трудоёмкости расчёта, поскольку если исследовать каждую точку отдельным импульсом, то полный расчёт даже вышеописанной простейшей геометрии занимает долгое время.

По результатам компьютерного моделирования были получены следующие графики дисперсионной зависимости нелинейных показателей поглощения и преломления (см. рис. 1). На графиках приводится сравнение с кривыми, описывающими экспериментальные данные для плёнки 1 типа из статьи [3]. Спектральная ширина источника была подобрана так, что в волновом пакете умещалось порядка 200 – 300 периодов колебаний поля на центральной частоте. Соответствующая интенсивность источника в максимуме была порядка 2 мегаватт на квадратный сантиметр. Как видно из рисунков, кривая нелинейного показателя поглощения хорошо соответствует эксперименту, положения экстремумов и их относительная величина лишь немного отличаются от величин, описывающих экспериментальные данные.

Показано, что метод моделирования кубической нелинейной восприимчивости с помощью расчёта отклика на поле модельной многоуровневой системы оказался приемлемым. Результаты компьютерной симуляции оказались близки к значениям, полученным в экспериментах. Разработанный в настоящей работе подход поможет применять метод FDTD для теоретического анализа нелинейных свойств гибридных металлоорганических наночастиц, что является важной и актуальной задачей.

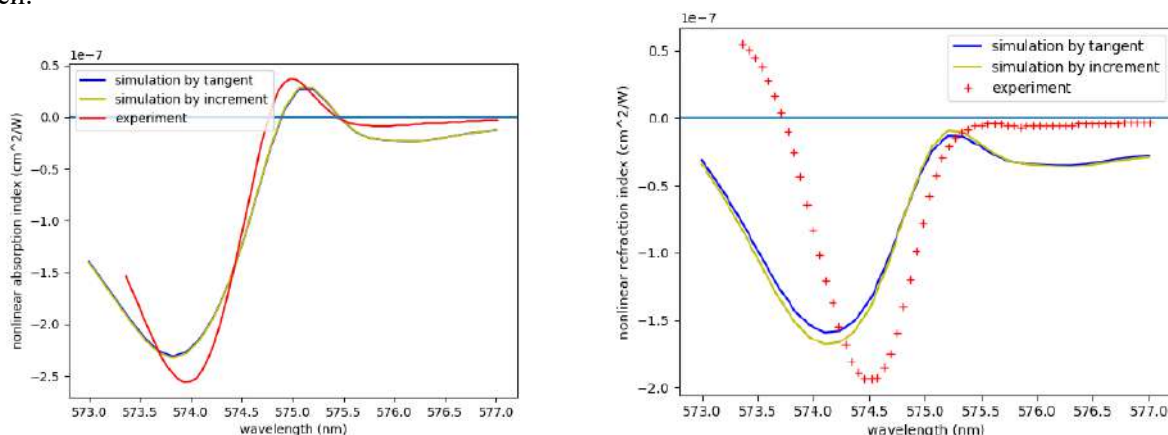


Рис. 1. Зависимости нелинейных показателей поглощения (слева) и преломления (справа) от длины волны. Сплошные синие и желтые кривые построены в результате численного моделирования в рамках предлагаемого подхода. Красные кривые построены согласно экспериментальным данным [3].

Литература

1. Taflov A., Hagness S.C., Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, 2nd edition, Artech House, 2000.
2. <https://meep.readthedocs.io/en/latest/>
3. Markov R.V. [et al], Nonlinear optical properties of two types of PIC J-aggregates in thin films // Optical Information Science and Technology (OIST97): Optical Recording Mechanisms and Media. 1998. V. 3347. p. 176.
4. Boyd R.W., Nonlinear Optics, 3rd edition, Elsevier 2008.

УДК 535.015

Моделирование субволнового спектрального переключателя методом дискретных диполей

А.В. Мекшун^{1,2}, А.Д. Кондорский²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Одним из актуальных направлений нанофотоники является разработка устройств субволновых размеров, способных направленно рассеивать свет в зависимости от длины волны (субволновые спектральные маршрутизаторы). Подобные устройства состоят из набора наночастиц, оптические свойства которых существенно отличаются. Принцип работы такого рода устройств основан на интерференции световых волн, рассеянных этими отдельными наночастицами. Путем подбора материала наночастиц и их формой можно эффективно управлять частотными зависимостями диаграмм рассеяния всей системы. В настоящей работе проведено компьютерное моделирование рассеяния света набором малых наночастиц методом аппроксимации дискретных диполей (DDA) [1] и проведены расчеты ряда конкретных схем субволновых мультиплексоров. Предложены новые схемы наночастиц, позволяющие управлять длиной волны переключения, а также проведен расчет более сложной схемы, представляющей собой объединение двух простых. Показано, что такая схема демонстрирует более богатую картину индикатрис рассеяния для различных длин волн излучения.

Используя описанный выше подход, получены известные результаты для уединенных сфер и сфероидов из серебра (Ag) и золота (Au). Затем изучен эффект маршрутизации света на примере сплюснутых сфероидов серебро-золото рис. 1 и проведено сравнение с экспериментальными данными [2]. На рис. 2 демонстрируются соответствующие диаграммы направленности рассеянного излучения на длинах волн 390 нм и 540 нм.

Показано, что, используя вытянутые сфероиды можно управлять частотами переключений маршрутизатора изменяя отношение длин их полуосей. Этот эффект обусловлен существенной зависимостью частоты продольного плазмонного резонанса вытянутого сфероида. При увеличении отношения большей полуоси (далее обозначенной как c) сфероида к его малой полуоси (далее обозначенной как a) наблюдается сдвиг в длинноволновую область плазмонного резонанса. Например, для вытянутого сфероида из серебра продольный плазмонный резонанс при $c = 50$ нм и $a = 10$ нм наблюдается на длине волны порядка 620 нм, когда для обычной сферы расчет показывает порядка 360 нм. Показано, что, используя вытянутые наночастицы в системе Ag-Au можно управлять длиной волны переключения направления рассеяния. В частности, в системе вытянутых сфероидов из серебра и золота с параметрами для серебра $c = 40$ нм, $a = 20$ нм и для золота $c = 90$ нм, $a = 30$ нм имеет место переключение на длинах волн 400 нм и 420 нм. Таким образом, нами предложена система с очень узким частотным интервалом переключения (~ 20 нм). Для аналогичной системы, но с параметрами для серебра $c = 45$ нм, $a = 15$ нм и для золота $c = 210$ нм, $a = 30$ нм переключение наблюдается на длинах волн 460 нм и 490 нм. Отметим здесь существенную особенность: спектральное расстояние между режимами рассеяния существенно уменьшилось по сравнению с предыдущим случаем сплюснутых сфероидов.

Поскольку спектральные диапазоны переключения каждой из описанных выше систем не пересекаются, нами предложена комбинированная система многочастотного субволнового мультиплексора, состоящего из четырех параллельных вытянутых наночастиц серебра и золота, демон-

стрирующую так называемые спектральные «качания» рис. 3. В частотных зависимостях диаграммах рассеяния данной системы наблюдаются ярко выраженные переключения направлений рассеяния рис. 4. Хотя для некоторых частот отношения интенсивностей рассеяния в направлении переключения к интенсивности рассеяния в обратном направлении оказывается меньше, чем у одиночной пары наночастиц, предложенная схема демонстрирует принципиальную возможность реализации многочастотных субволновых спектральных переключателей. Данные результаты представляют интерес для разработки принципов функционирования логических элементов нанопотонных интегральных схем.

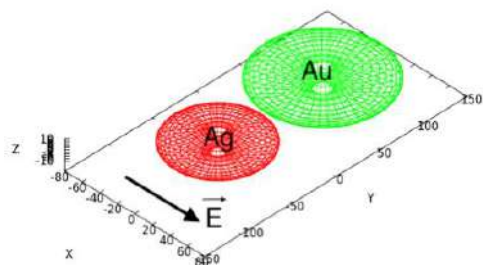


Рис. 1. Система Ag-Au, большие полуоси, соответственно, $a = 50$ нм и $a = 65$ нм, малые $c = 10$ нм, расстояние между центрами 120 нм

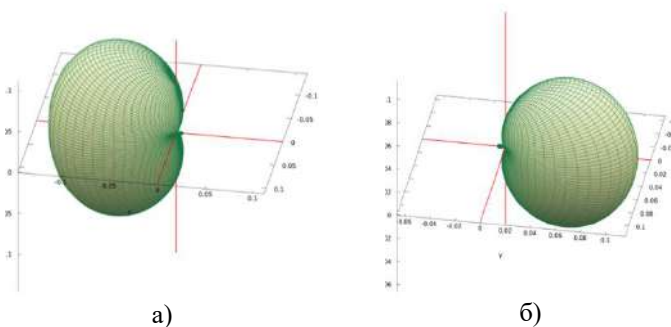


Рис. 2. Индикатрисы рассеяния системы Ag-Au а) $\lambda = 390$ нм б) 540 нм

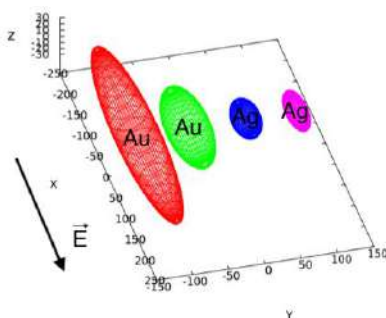


Рис. 3. Конфигурация 2Au-2Ag, $c = 210$ нм, $a = 30$ нм, $c = 90$ нм, $a = 30$ нм, $c = 40$ нм, $a = 20$ нм $c = 45$ нм, $a = 15$ нм, частицы расположены симметрично относительно начала координат на расстояниях 40 нм и 110 нм

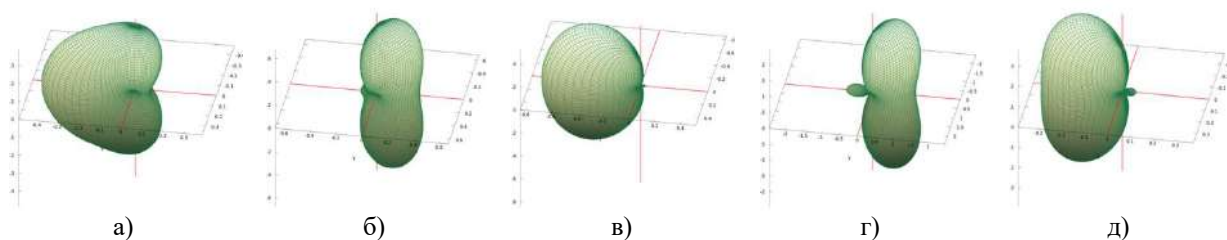


Рис. 4. Индикатрисы рассеяния системы 2Au-2Ag а) 360 нм б) 400 нм в) 420 нм г) 470 нм д) 500 нм

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант No 19-79-30086).

Литература

1. Климов В. В. Наноплазмоника. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. – 490 с.
2. Shegai T. [et al.] A bimetallic nanoantenna for directional colour routing // *Nat Commun.* 2011. V. 2. P. 481.

Наблюдение узких спектральных линий в фононном крыле GeV--центров в НРНТ микроалмазах

А.Ю. Нелюбов^{1,2}, И.Ю. Еремчев³, Е.А. Екимов⁴, А.В. Наумов³

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Сколковский институт науки и технологий

³Институт спектроскопии РАН

⁴Институт физики высоких давлений РАН

Центры окраски в алмазе типа германий-вакансия (GeV-) и кремний-вакансия (SiV-) образуются в результате замещения двух атомов углерода в решетке алмаза атомом Ge и Si соответственно. Интерес к этим центрам связан с их уникальными оптическими свойствами: наличие узкой бесфононной спектральной линии (БФЛ), большому значению фактора Дебая-Валлера даже при комнатной температуре, высокой фотостабильности. Эти свойства делают их перспективными в качестве спектрально узких источников одиночных фотонов, биомаркеров, наносенсоров и находят применение в нанофотонике, оптической термометрии, в биологических исследованиях (см., напр., [1,2]).

В данной работе исследовались одиночные микро- и наноалмазы, синтезированные методом высоких давлений и высоких температур (НРНТ), содержащие GeV-центры окраски. Типичный спектр люминесценции таких центров при комнатной температуре представляет собой узкую (FWHM ~ 5 нм) яркую БФЛ с центром на длине волны ~603 нм, соответствующую электронному 0-0 переходу, а также широкое бесструктурное фононное крыло (ФК) занимающее спектральный диапазон от ~ 600 нм до ~660 нм (Рис. 1а). Подробное описание экспериментальной установки дано в [3]. В ходе проведенных исследований были обнаружены участки одиночных микроалмазов (или группы алмазов субмикронных размеров) с нетипичными спектрами фотолюминесценции. Помимо характерных GeV- БФЛ и ФК была обнаружена целая серия очень узких спектральных линий (FWHM < 1 нм), выделяющихся на фоне ФК (Рис. 1а). Форма суммарного спектра (число, спектральное положение линий, взаимная интенсивность) резко менялась при перестройке длины волны возбуждающего излучения (узкополосного лазера). Примечательно, что подавляющее большинство обнаруженных спектральных линий характеризовалось узким резонансным возбуждением и большим стоксовым сдвигом спектра люминесценции. Характерные ширины спектров возбуждения люминесценции исследованных линий составляли величины порядка 1 нм (Рис. 1б), а стоксов сдвиг линии люминесценции - величины ~1450 см⁻¹.

Еще одним важным результатом является обнаруженное скачкообразное необратимое (на протяжении десятков часов) фотовыжигание ряда обнаруженных узких спектральных линий при резонансном интенсивном возбуждении. Кроме того, для ряда линий наблюдалось мерцание люминесценции - обратимые переходы между двумя состояниями интенсивности линии – ярким и темным (безызлучательным). Обнаруженные эффекты косвенно свидетельствуют о том, что часть обнаруженных линий соответствуют свечению одиночных центров окраски. Более точные измерения, основанные на измерении антигруппировки фотонов в узкой спектральной области, не дали результатов из-за большого остаточного вклада сигнала ФК от ансамбля GeV центров.

Возможным объяснением наблюдаемых линий может быть наличие помимо GeV- других примесных центров неизвестной природы. Однако, совпадение областей спектров возбуждения и люминесценции с GeV-центрами, огромный стоксовый сдвиг линии люминесценции, а также одиночный характер обнаруженных излучателей может свидетельствовать в пользу того, что обнаруженные линии соответствуют электронно-колебательным повторениям спектра одиночных GeV-центров, находящихся в локальном окружении, сильно отличающемся от окружения основного ансамбля GeV-центров в микроалмазе. Дальнейшие исследования природы этих линий представляют большой научный интерес и в дальнейшем могут помочь проводить контролируемый синтез образцов с наиболее привлекательными оптическими свойствами.

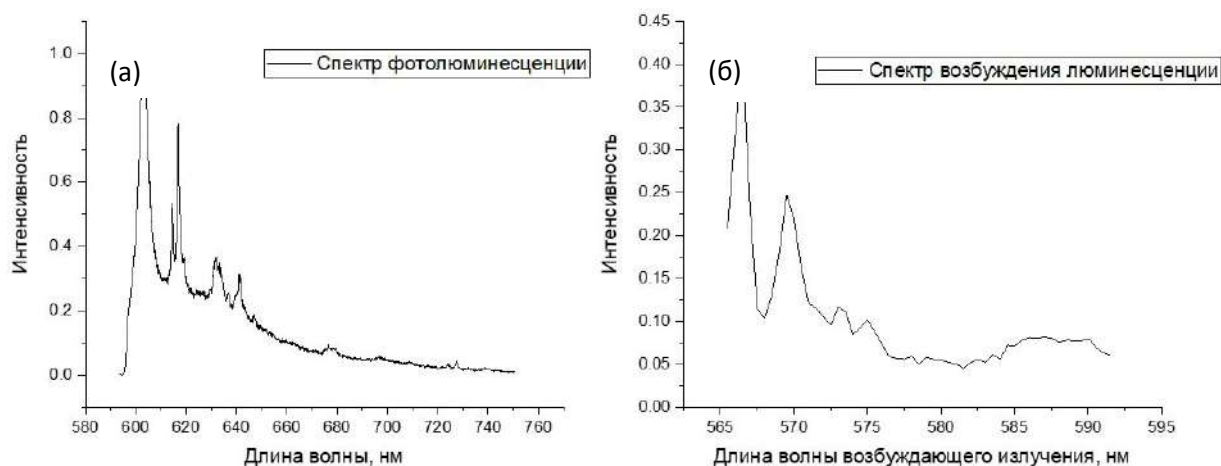


Рис.1. Спектры фотолюминесценции и возбуждения люминесценции одиночного микроалмаза, содержащего GeV-центры. (а) Пример спектра фотолюминесценции микроалмаза с GeV-центрами при возбуждении в районе 565 нм, в котором наблюдаются узкие линии в области фоновонного крыла GeV-центров; (б) пример спектра возбуждения люминесценции для линии с центром на длине волны 614,2 нм.

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-29-19200.

Е.А. Екимов (синтез алмазных образцов) выражает признательность за поддержку Российскому Научному Фонду Грант № 19-12-00407.

Литература

1. F. Jelezko, J. Wrachtrup, "Single defect centres in diamond: A review", *Physica Status Solidi a-Applications and Materials Science*, 203, 13, (2006) 3207-3225.
2. Кудрявцев О.С., Хомич А.А., Седов В.С., Екимов Е.А., Власов И.И. «ФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ И КР-СПЕКТРОСКОПИЯ ЛЕГИРОВАННЫХ НАНОАЛМАЗОВ» *Журнал прикладной спектроскопии*. 2018. Т. 85. № 2. С. 280-284.
3. И.Ю. Еремчев, М.Ю. Еремчев, А.В. Наумов, "Многofункциональный люминесцентный наноскоп дальнего поля для исследования одиночных молекул и квантовых точек (к 50-летию Института спектроскопии РАН)", *Успехи Физических Наук*, 189, 3, (2019) 312-322.

УДК 535.33

Неинвазивные методы диагностики новообразований кожи

М.Р. Теменова, Л.Н. Акимов, А.А. Морятков

Самарский государственный медицинский университет

Новообразования кожи остаются одной из самых актуальных проблем в онкологии, высокая заболеваемость, трудности дифференциальной диагностики по-прежнему определяют существенные показатели смертности от меланомы кожи. Существующие методы неинвазивной диагностики связаны с использованием сложной аппаратуры или субъективного опыта врачей-специалистов и делают их недоступными для массового применения.

Целью исследования было изучение эффективности анализа флуоресценции биологической ткани (АФ) в ближнем инфракрасном диапазоне при проведении спектроскопии комбинационного рассеяния (СКР).

Пациенты и методы: Учитывая, что интенсивность АФ определяется индивидуальным фенотипом кожи проанализированы нормализованные спектры АФ полученные путем регистрации АФ в области новообразования и участка здоровой кожи, в исследовании приняли участие 88 пациентов.

Результаты: В диапазоне 870 – 920 нм спектральная плотность интенсивности АФ линейно спадает с ростом длины волны, а наибольшие изменения в спектре АФ наблюдались в диапазоне 810 – 870 нм. Для анализа экспериментальных данных в указанном диапазоне была проведена ап-

проксимация спектральной интенсивности АФ экспоненциальной функцией. Результаты, полученные в ходе проведенного экспериментального исследования, показывают возможность использования формы спектра АФ в ближней инфракрасной области для диагностики. Важным достоинством данного метода является его инвариантность относительно размеров опухоли и высокая скорость анализа информации.

Выводы: Наилучшие результаты диагностики меланомы достигаются при использовании комплексных критериев формы, выделенных при аппроксимации спектра автофлуоресценции экспоненциальной функцией. Точность диагностики меланомы достигает 88.4% для *ex vivo* исследований, 86.2% для *in vivo* исследований.

Литература

1. Братченко И.А., Алонова М.В., Мякинин О.О., Морятков А.А., Козлов С.В., Захаров В.П. Гиперспектральная визуализация патологий кожи в видимой области// Аспирантский вестник Поволжья. – 2016 – № 1-2. – С. 164-166.

УДК 538.956

Низкочастотная нелинейная диэлектрическая спектроскопия нематического жидкого кристалла в планарной и неориентированной ячейке

М.В. Гавриляк^{1,2}, А.М. Гавриляк¹, Ф.В. Подгорнов¹

¹Южно-уральский государственный университет

²Институт электрофизики УрО РАН

Жидкими кристаллами (ЖК) называют особый класс веществ, которые совмещают в себе некоторые свойства жидкости и твердого кристаллического тела. Благодаря оптической, электрической и магнитной анизотропии, а также возможности переориентации молекул в электрическом поле, ЖК нашли большое применение в дисплейной технике [1], оптических бистабильных переключателях [2] и датчиках давления [3].

Свойства жидких кристаллов подробно изучены методами импедансной и диэлектрической спектроскопии [4,5]. Данные методы традиционно применяются с использованием малых осциллирующих напряжений, прикладываемых к жидкокристаллической ячейке. Спектры импеданса и диэлектрической проницаемости представлены в виде комплексных функций:

$$Z^*(\omega) = Z'(\omega) - iZ''(\omega) = \frac{U^*(\omega)}{I^*(\omega)}, \quad (1)$$

$$C^*(\omega) = \frac{1}{i\omega Z^*(\omega)}, \quad (2)$$

$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon'(\omega) - i\varepsilon''(\omega) = \frac{C^*(\omega)}{C_0}, \quad (3)$$

где $Z^*(\omega)$ – комплексный импеданс, i – мнимая единица, ω – частота, $C^*(\omega)$ – ёмкость, $\varepsilon^*(\omega)$ – комплексная диэлектрическая проницаемость, C_0 – ёмкость пустой ячейки.

Метод нелинейной диэлектрической спектроскопии основан на том, что на исследуемый объект подаётся большое осциллирующее напряжение. При этом пропадает линейная зависимость тока от напряжения, что проявляется в появлении вклада высших гармоник в общий спектр диэлектрической проницаемости. Спектр диэлектрической проницаемости на высших гармониках получен с помощью формул (1), (2) и (3) с применением интегрального преобразования Фурье. В работе [6] методом нелинейной диэлектрической спектроскопии исследованы сегнетоэлектрические жидкие кристаллы. Однако в литературе практически отсутствуют исследования данным методом нематических жидких кристаллов.

В настоящей работе исследовалась жидкокристаллическая смесь Е7, это термотропный жидкий кристалл, проявляющий нематическую фазу при комнатной температуре. Для проведения измерения нелинейного спектра диэлектрической проницаемости изготовлены ячейки с планарной ориентацией молекул ЖК и неориентированные ячейки. Ячейки с планарной ориентацией, представляющие собой две параллельных стеклянных пластины, покрытые проводящим слоем ИТО с нанесенным слоем полимера для задания планарной ориентации (рис.1).

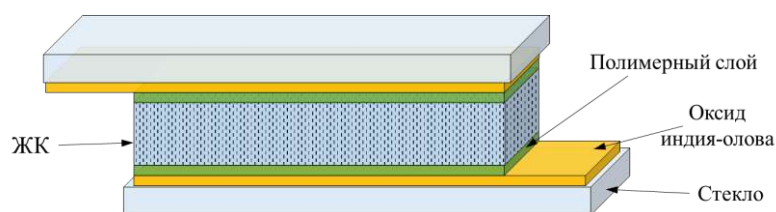


Рис. 1. Структура жидкокристаллической ячейки с планарной ориентацией.

Толщина зазора полученных ячеек проверялась спектральным оптическим методом и составила $d_{\text{планар}} = 18,1$ мкм для планарной ячейки и $d_{\text{неор}} = 5.6$ мкм для неориентированной ячейки.

Спектры нелинейной диэлектрической проницаемости ЖК смеси E7 были измерены с помощью импедансного спектрометра novocontrol beta system в частотном диапазоне от 0.5 мГц до 600 Гц при осциллирующем напряжении $V_{\text{ас}} = 3$ В. Измерения проводились при комнатной температуре ($T = 25$ °С) в нематической фазе жидкого кристалла в планарной и неориентированных ячейках (рис.2).

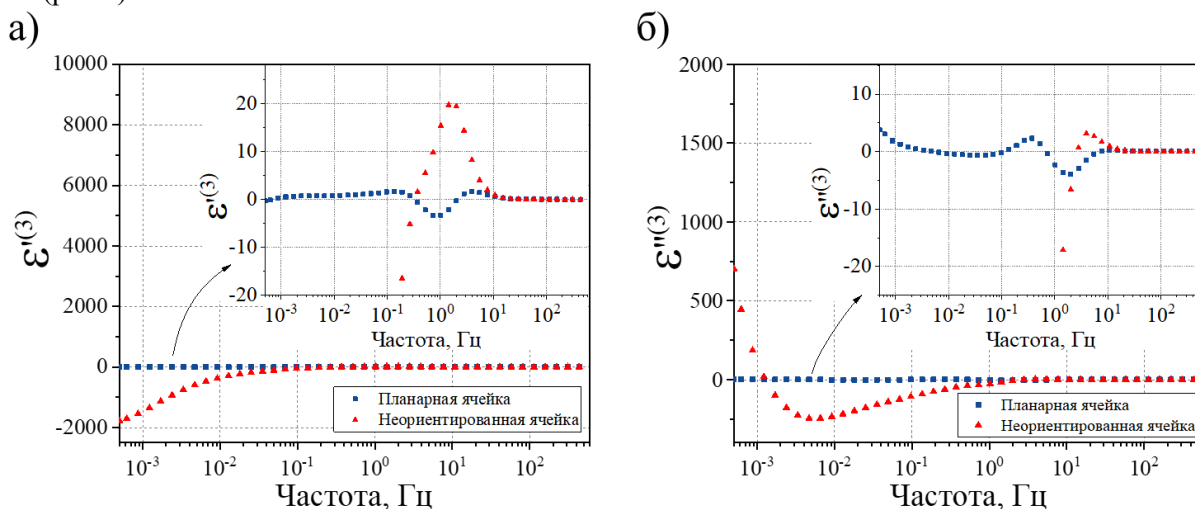


Рис. 2. Спектры 3-ей гармоники действительной (а) и мнимой (б) части диэлектрической проницаемости нематического жидкого кристалла в планарной и неориентированной ячейках.

Из графиков видно, что в диапазоне частот 10 – 600 Гц спектры диэлектрической проницаемости третьей гармоники в планарной ячейке не отличаются от спектров неориентированной ячейки. С дальнейшим понижением частоты до 0.5 мГц появляется заметная разница между спектрами.

Таким образом, в нелинейных спектрах диэлектрической проницаемости нематического жидкого кристалла в планарной и неориентированной ячейках доказано присутствие только нечетных гармоник (3) и практически полное отсутствие четных (2, 4). Это может быть связано с зависимостью ионных процессов от знакопеременного поля. Разница в низкочастотной области спектров нелинейной диэлектрической проницаемости 3-ей гармоники объясняется наличием полимерного ориентирующего слоя в планарной ячейке, который выступает в качестве блокирующего электрода, что проявляется в низких частотах.

Литература

1. Chen H., Gou F., Wu S.T. Submillisecond-response nematic liquid crystals for augmented reality displays //Optical Materials Express. 2017. V. 7. P. 195-201.
2. Kim J.H. et al. Bistable switching between homeotropic and focal-conic states in an ion-doped chiral nematic liquid crystal cell //Optics Express. 2017. V. 25. P. 29180-29188.
3. Zharkova G.M. et al. Optical polymer liquid crystal pressure sensors //AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing LLC, 2017. V. 1893. P. 030001.
4. Naito H. et al. Dielectric properties of nematic liquid crystals in low frequency regime //Molecular Crystals and Liquid Crystals Science and Technology. Section A. Molecular Crystals and Liquid Crystals. 1995. V. 262. P. 249-255.
5. Karaawi A.R. et al. Direct current electric conductivity of ferroelectric liquid crystals–gold nanoparticles dispersion measured with capacitive current technique //Liquid Crystals. 2020. P. 1-9.

6. Leblond J.M. et al. Non linear dielectric spectroscopy: a method to determine physical parameters of ferroelectric liquid crystals //The European Physical Journal Applied Physics. 2006. V. 36. P. 157-163.

УДК 533.9.072

Определение энергии химического сдвига в металлах и их оксидах методом функционала плотности

Базулин И.А.^{1,2}, Виноградова А.В.^{1,2}, Rogozin K.A.^{1,2}, Коньков А.А.^{1,2}

¹Национальный исследовательский университет «МЭИ»

²ГНЦ РФ ТРИНИТИ

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия – спектроскопический метод исследования элементного состава, химического и электронного состояния атомов, на поверхности изучаемого материала. Она основана на явлении внешнего фотоэффекта, который описывается уравнением Эйнштейна. С помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии можно определить относительные концентрации элементов, входящих в исследуемое соединение, а также провести послойный анализ. Для расшифровки и верной интерпретации полученных спектров необходимо знать значение энергии связи электронов в атомах, из которых состоит исследуемое вещество. Определение значения энергии связи является большой проблемой. Связано это с тем, что точное значение энергии связи электрона в атоме зависит от его химического окружения. Значение энергии электрона на внутренней оболочке определяется кулоновским взаимодействием с другими электронами и притягивающим потенциалом ядра. Любое изменение химического окружения вызывает перераспределение заряда валентных электронов данного атома в пространстве, а также изменение потенциала заметное для внутреннего электрона. Сдвиг энергий связи внутренних электронов в зависимости от химического окружения происходит на некоторую величину ΔE_{ch} . Эта величина есть разница между энергией связи электрона в соединении и энергией связи электрона, составляющих это соединение чистых элементов, и называется энергией химического сдвига. Существуют экспериментальные базы данных, однако значения энергий связи в них сильно различаются. Для соединений данные зачастую противоречат друг другу или вовсе отсутствуют. В особенности это касается нитридов, так как работ посвященных определению их энергии связи крайне мало. Именно поэтому определение значений энергий связи является важнейшей задачей, решение которой необходимо для верной расшифровки спектров и проведении последующих анализов.

В данной работе был проведён квантово-механический расчёт значений энергии связи ниобия и его оксидов со степенями окисления II, IV и V. Расчёт энергий орбиталей проводился методом функционала плотности. Для реализации расчётной схемы по данному методу использовался программный пакет ORCA, разработанный институтом Макса Планка, Германия. Для работы с данной программой необходимо четкое понимание принципа расчёта методом функционала плотности, так как это влияет на выбор начальных параметров, которые задаются в качестве входных данных. Теорема Кона-Хозенберга [2] доказывает, что энергия основного состояния молекулы есть функционал электронной плотности, однако не говорит как этот функционал найти. Поэтому нет четкой схемы решения и подбор вида функционалов и набора базисных функций является нетривиальной задачей. Также, для начала расчёта необходимо задать координаты атомов, входящих в исследуемое соединение. Это можно делать вручную, однако это тяжелая задача. Для этого использовался программный пакет Avogadro. Данная программа позволяет задать пространственное строение исследуемых молекул и получить координаты атомов, входящих в них. В результате расчёта были получены энергии связи для чистого ниобия и его оксидов, а также рассчитаны энергии химического сдвига:

Соединение	Энергия связи, eV	Энергия химического сдвига, eV	Степень окисления ниобия
Чистый Nb	201.8	-	0
NbO	203.9	2.1	II
NbO ₂	206.1	4.3	IV
Nb ₂ O ₅	207.3	5.5	V

На рис. 1. изображена зависимость энергии связи ниобия от степени окисления. Синими точками нанесены значения энергий связи, полученные в ходе работы. Экспериментальные точки отлично аппроксимируются прямой. Полученная зависимость имеет вид:

$$BE(OS) = 1.1 \cdot OS + 201.8$$

Данная зависимость позволяет вычислить значения энергий связи для оксидов с другими степенями окисления и, при разложении спектров, идентифицировать неизвестные оксиды.

В дальнейшем планируется провести аналогичные расчёты для других металлов и их соединений. Это позволит улучшить качество обработки получаемых спектров. Также планируется произвести расчёт для более сложных структур: кластеров, кристаллических решеток и больших наноразмерных систем.

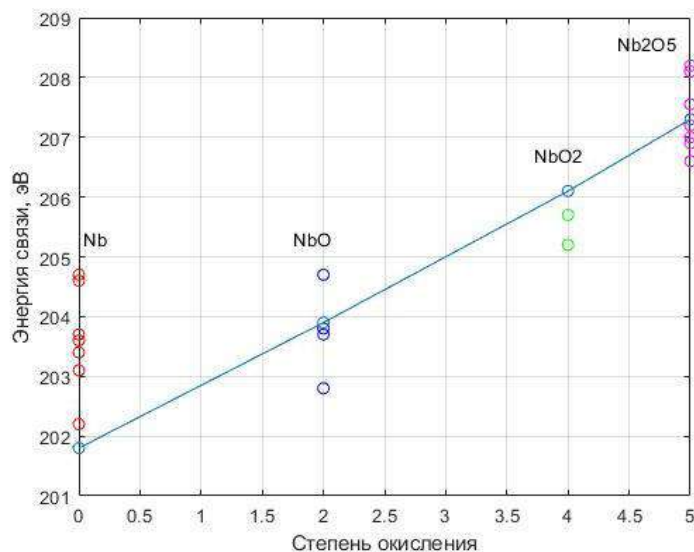


Рис. 1. Зависимость энергии связи Nb от степени окисления

Литература

1. В.Г. Заводинский Квантово-механические методы исследования наноразмерных систем. / В.Г. Заводинский, А.А. Гниденко – Хабаровск, 2013-49 с.

УДК 535.015

Оптимизация усиления ближнего поля при резонансном рассеянии света наночастицами

Е.А. Трухан

МГУ им. М.В.Ломоносова

В современной субволновой оптике задача о достижении концентрации электромагнитного поля высокой интенсивности в возможно более малой области пространства помимо чисто академического интереса, который она представляет, чрезвычайно важна для широкого класса приложений, таких как оптическая визуализация нанообъектов, спектроскопия сверхвысокого разрешения, биосенсорика, обработка и запись информации высокой плотности и др. Одним из путей решения такой задачи является использования эффектов резонансного рассеяния света наночастицами [1][2][3], при котором может происходить высокая концентрация падающего электромагнитного излучения вблизи поверхности рассеивающей частицы [4]. Однако, хотя точное решение Ми, описывающее такое рассеяние сферической частицей хорошо известно и входит в учебники [5], детальный анализ интенсивности различных компонент электрического и магнитного полей в ближней волновой зоне для частиц, с оптическими свойствами реальных материалов до сих пор не проводился.

В настоящей работе представляются результаты такого анализа, проведенные с использованием табличных экспериментальных данных по дисперсии диэлектрической проницаемости для различных, широко используемых в нанопотонике веществ и приводятся практические рекомендации по оптимизации эффекта.

Литература

1. B. S. Luk'yanchuk, Z. B. Wang, M. I. Tribelsky, V. Ternovsky, M. H. Hong, T. C. Chong, Peculiarities of light scattering by nanoparticles and nanowires near plasmon resonance frequencies, *Journal of Physics: Conference Series* 59 (2007) 234–239.
2. M. I. Tribelsky, A. E. Miroshnichenko, Dynamics of destructive Fano
3. resonances, *Phys. Rev. A.*, 100, 053824 (2019);
4. M. I. Tribelsky, A. E. Miroshnichenko, Giant In-Particle Field Concen-
5. tration and Fano Resonances at Light Scattering by High-Refractive Index Particles,
6. *Phys. Rev. A.* 93, 053837 (2016) 22pp.
7. M. I. Tribelsky, B. S. Luk'yanchuk, Anomalous Light Scattering by Small Particles, *Phys. Rev. Lett.* 97, 263902 (2006).
8. C. F. Bohren, D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley, New York, 1998.

УДК 535.36

Оптическая диагностика одиночных диэлектрических наночастиц на поверхности стеклянных и кварцевых пластинок

Г.О. Силаев, Ф.В. Верещагин, Ю.Г. Вайнер

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

При экспериментальной работе с наночастицами остро стоит задача контролируемого нанесения одиночных частиц на поверхность пробных пластинок, в качестве которых часто используются стеклянные или кварцевые пластинки. Использование для такого контроля электронного микроскопа сопряжено с большими трудностями ввиду непрозрачности таких пластинок для пучка электронов, высокой стоимости электронного микроскопа, сложности и малой доступности таких измерений и невозможности проводить измерения оперативно. Измерения на атомно-силовом микроскопе также не всегда доступны и требуют значительного времени.

Доклад посвящен изложению результатов разработки методов нанесения и оперативного контроля одиночных диэлектрических наночастиц LaF_3 , допированных ионами Nd^{3+} , размерами от 10 до 25 нм, на пробные стеклянные и кварцевые пластинки. Визуализация осуществлялась с помощью специально разработанного для этого лазерного темнопольного микроскопа, работающего по схеме «светового листа» (light sheet), в режиме регистрации рассеянного излучения несмещенной частоты. Разработанный микроскоп позволял регистрировать на поверхности пластинок и в кювете с водой наночастицы размерами 10 нм и менее. Индивидуальные размеры наночастиц определялись путем регистрации и анализа траекторий броуновского движения наблюдаемой наночастицы в воде.

Разработанная методика включала следующие процедуры:

а) глубокая очистка поверхности пластинок; б) оптический контроль качества очистки поверхности пластинок; в) нанесение наночастиц на поверхность пластинок; г) оптический контроль нанесенного слоя наночастиц. Для определения координат наблюдаемых наночастиц на поверхность изучаемых пластинок наносились по специально разработанной методике нано- и микроцарапины.

УДК 538.958

Оптические свойства низкоразмерных перовскитоподобных галогенидов свинца с катионами пиридиния и его производными

А.Ю. Самсонова, Ю.В. Капитонов, Н.И. Селиванов, А.В. Емелин

Санкт-Петербургский государственный университет

Многочисленные исследования галогенидных перовскитов демонстрируют возможность их применения для создания новых светодиодов, солнечных ячеек и лазеров [1],[2], поэтому изучение оптических свойств этих материалов представляет большой интерес для нанофотоники. В последнее время широко исследуются низкоразмерные галогенидные структуры перовскита: перовскиты Раддлсдена-Поппера [1], гофрированные двумерные перовскиты [3] и т.д., — благодаря проявляющемуся в них эффекту квантового ограничения и возможности контролировать оптические свойства варьированием химического состава.

Низкоразмерные перовскитоподобные структуры можно получить путём выбора органического катиона А в галогенидных перовскитах $APbX_3$ (X — галоген). Замена катиона А катионом большего размера, таким, что для него фактор толерантности становится больше 1, приводит к разрыву новым катионом кубического каркаса из октаэдров-анионов $[PbX_6]^{4-}$. В результате органическая подсистема, разрывающая связь галоген-свинец и заполняющая пространство между неорганической системой октаэдров $[PbX_6]^{4-}$, исполняет роль энергетического барьера. Кристаллическая структура перовскита изменяется и его размерность понижается.

Мы представляем исследование оптических свойств серии двумерных и одномерных монокристаллов перовскитоподобных галогенидов свинца с катионом пиридиния и его производными. На рис. 1 представлена их кристаллическая структура, полученная методом рентгеноструктурного анализа. Видно, что соединение $(3-NH_2-Py)PbI_4$ состоит из слоёв октаэдров, тогда как кристаллические структуры соединений $(3-CH_3-Py)PbI_3$ и $PuPbI_3$ аналогичны друг другу с небольшими отличиями и состоят из одинарных цепочек октаэдров. Октаэдры в этих цепочках соединены друг с другом гранями.

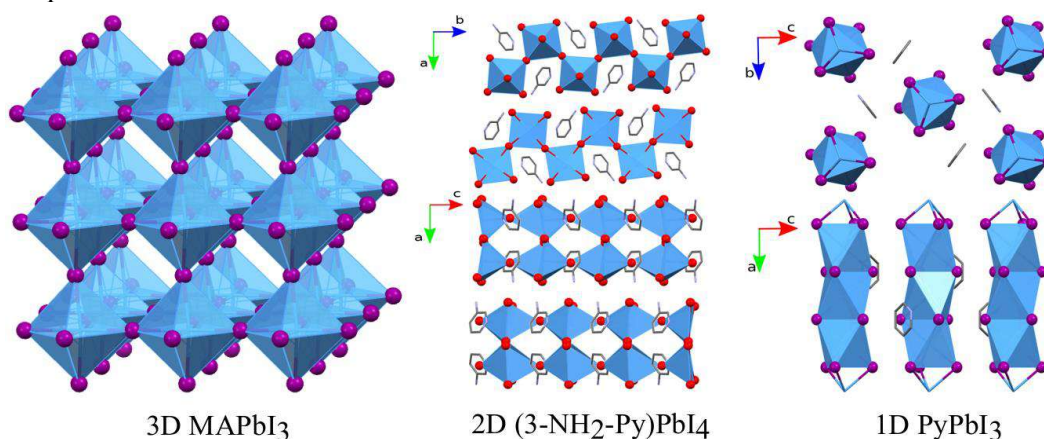


Рис. 1. Кристаллическая структура исследуемых соединений.

Спектр фотолуминесценции (ФЛ) $MAPbI_3$ (рис. 2) при $T = 4$ К демонстрирует узкий резонанс рекомбинации свободного экситона, в то время как в ФЛ-спектрах низкоразмерных $(3-NH_2-Py)PbI_4$, $(3-CH_3-Py)PbI_3$ и $PuPbI_3$ проявляется широкополосное излучение, которое мы приписываем рекомбинации автолокализованного экситона. В ФЛ-спектре $PuPbI_3$ одновременно наблюдается широкая полоса излучения, линии рекомбинации локализованного и свободного экситонов с положениями максимумов 1,77, 2,20 и 2,26 эВ соответственно. Ширина запрещённой зоны E_g $PuPbI_3$ равна 3 эВ [4], что в 2 раза больше, чем E_g в $MAPbI_3$. А так как энергия связи экситона E_b оценивается как разность между E_g и положением максимума резонанса свободного экситона, то в $PuPbI_3$ она равна 0,6 эВ, что почти в 40 раз больше, чем E_b в $MAPbI_3$. Таким образом, понижение размерности галогенида свинца от трёхмерной до одномерной в случае $MAPbI_3$ и $PuPbI_3$ привело к двойному увеличению E_g и 40-кратному увеличению E_b .

Так как наблюдалось отсутствие резонанса свободного экситона при $T = 77$ К [4], было проведено исследование ФЛ-спектра $PuPbI_3$ в зависимости от температуры (рис. 2.). С увеличением температуры наблюдается синий сдвиг всех полос излучения. Интенсивность излучения свободного экситона быстро уменьшается, пока не исчезает при $T = 70$ К. Это связано с преодолением экситоном потенциального барьера между состояниями свободного и автолокализованного экситона. В это же время интенсивность излучения автолокализованного экситона увеличивается, а после $T = 70$ К начинает медленный спад, так как экситон преодолевает потенциальный барьер между состоянием автолокализованного экситона и безызлучательной рекомбинацией. Величины данных потенциальных барьеров определяются с помощью решения кинетических уравнений.

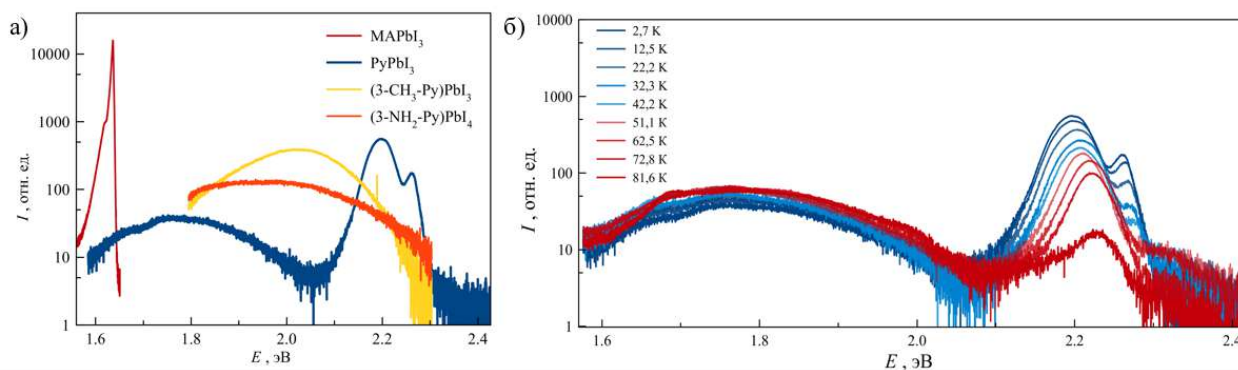


Рис. 2. а) ФЛ-спектры исследуемых соединений при $T = 4$ К в логарифмическом масштабе, б) ФЛ-спектр PyPbI_3 при нагревании от 2,7 К до 81,6 К в логарифмическом масштабе.

Таким образом, ограничение движения квазичастиц вдоль одномерных нитей или двумерных слоёв неорганических октаэдров $[\text{PbX}_6]^{4-}$ в низкоразмерных перовскитоподобных галогенидах свинца приводит к увеличению ширины запрещённой зоны E_g и энергии связи экситона E_b , что прослеживается в исследовании монокристалла PyPbI_3 . Широкополосное излучение рекомбинации автолокализованных экситонов проявляется в ФЛ-спектрах исследуемых низкоразмерных структур, а зависимость ФЛ-спектра одномерного PyPbI_3 от температуры позволяет определить величину барьера между состояниями свободного экситона и автолокализованного экситона, а также предполагает перспективы более точного исследования переходов экситона при изменении температуры между различными энергетическими состояниями.

Данная работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-03-00836 А на оборудовании ресурсного центра «Нанопотоника».

Литература

1. *Chen H. et al.*. Structural and spectral dynamics of single-crystalline Ruddlesden-Popper phase halide perovskite blue light-emitting diodes // *Sci. Adv.* 2020. V. 2. P. 4045.
2. *Li Zh., Moon J., Gharajeh A., Haroldson R., Hawkins R., Hu W., Zakhidov A., Gu Q.* Room-Temperature Continuous-Wave Operation of Organometal Halide Perovskite Lasers // *ACS Nano*. 2018. V. 12, 11. P. 10968–10976.
3. *Dohner E.R., Jaffe A., Bradshaw L.R., Karunadasa H.I.* Intrinsic White-Light Emission from Layered Hybrid Perovskites. // *J. Am. Chem. Soc.* 2014. V. 136, 38. P. 13154–13157.
4. *Selivanov N.I., Rozhkova Yu.A., Kevorkyants R., Emeline A.V., Bahnmann D.W.* The effect of organic cations on the electronic, optical and luminescence properties of 1D piperidinium, pyridinium, and 3-hydroxypyridinium lead trihalides // *Dalton Trans.* 2020. V. 49. P. 4390–4403.

УДК 532.42

Применение оптимизационных алгоритмов распознавания aberrаций волнового фронта по картине ФРТ

П.А. Хорин¹, С.Г. Волотовский², С.Н. Хонина^{1,2}

¹Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева

² ИСОИ РАН – филиала ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Рассматривается проблема распознавания aberrированного волнового фронта с помощью алгоритма оптимизации Левенберга-Марквардта. Данный алгоритм прилагается применить к комбинированным функциям рассеяния точки (ФРТ), сформированным многопорядковым (или многоканальным) дифракционным оптическим элементом (ДОЕ) в фокальной плоскости.

Общепринятым представлением волнового фронта является базис полиномов Цернике [1–2]. Коэффициенты разложения волнового фронта по ортогональным полиномам Цернике позволяют определить среднеквадратическую ошибку отклонения от идеального фронта. Коэффициенты с высоким абсолютным значением автоматически указывают на aberrации, которые наибольшим образом искажают волновой фронт. Для прямого измерения коэффициентов aberrаций волнового фронта оптической системы используются ДОЭ, согласованные с набором полиномов Цернике, которые были успешно применены для анализа волнового фронта с небольшими aberrациями [3].

Ранее были рассмотрены многоканальные ДОО, осуществляющие в различных дифракционных порядках согласованную фильтрацию фазовых распределений, соответствующих различным базисным функциям Цернике. Рассматриваемый подход позволяет реализовать оптическое разложение анализируемого поля по согласованному базису и одновременно формировать несколько дифракционных порядков, корреляционные максимумы в центрах которых пропорциональны квадратам модулей коэффициентов разложения. Для полного восстановления волнового фронта необходимо также измерение относительных фаз коэффициентов. Однако в этом случае потребуются существенное усложнение многопорядкового фильтра за счет дополнительных дифракционных порядков, согласованных с суперпозициями базисных функций, и потребуется последующая цифровая обработка.

В данной работе рассмотрен иной подход к возможности восстановления волнового фронта по картинам интенсивности функций рассеяния точки (ФРТ), формируемым многопорядковым ДОО в фокальной плоскости, с использованием оптимизационного алгоритма Левенберга-Марквардта. Рассмотрим aberrированный волновой фронт в виде поля, описываемого следующим образом:

$$g(r, \phi) = \exp[i\psi(r, \phi)] \quad (1)$$

Будем считать, что фаза в (1) представима суперпозицией функций Цернике:

$$\psi(r, \phi) = \sum_{n,m} b_{nm} Z_n^m(r, \phi) \quad (2)$$

$$Z_n^m(r, \phi) = A_n R_n^m(r) \begin{cases} \cos(m\phi) \\ \sin(m\phi) \end{cases}, \quad (3)$$

где

где $A_n = \sqrt{(n+1)/\pi}$ и $R_n^m(r)$ – радиальные полиномы Цернике, and b_{nm} – коэффициенты суперпозиции. ФРТ в фокальной плоскости линзы с aberrированным волновым фронтом (1) описывается с помощью преобразования Фурье:

$$G(\rho, \theta) = -\frac{i}{\lambda f} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} g(r, \phi) \exp\left[-i \frac{2\pi}{\lambda f} r \rho \cos(\theta - \phi)\right] r dr d\phi \quad (4)$$

где λ – длина волны излучения, f – фокусное расстояние линзы.

Рассмотрим задачу аппроксимации интенсивность поля (4) $I(\rho, \theta) = |G(\rho, \theta)|^2$ набором функций Цернике (3):

$$I_\Omega(\rho, \theta) = \left| \sum_{n,m \in \Omega} c_{nm} Z_n^m(\rho, \theta) \right|^2, \quad (5)$$

где Ω – определенное множество индексов.

Эту задачу можно формализовать как минимизацию следующего функционала:

$$\int_0^R \int_0^{2\pi} [I_\Omega(\rho, \theta) - I(\rho, \theta)]^2 \rho d\rho d\theta \rightarrow \min, \quad (6)$$

Для решения этой задачи лучше всего подходит алгоритм Левенберга-Марквардта, который минимизирует сумму квадратов M нелинейных функций N аргументов. Для его работы необходимо вычислять значения интенсивности и её якобиана в каждой точке.

Для вычисления частных производных используем формулу:

$$I'_p = (\psi \cdot \psi^*)'_p = \psi'_p \cdot \psi^* + \psi \cdot (\psi^*)'_p = \psi'_p \cdot \psi^* + \psi \cdot (\psi'_p)^* = \psi'_p \cdot \psi^* + (\psi'_p \cdot \psi^*)^* = 2 \operatorname{Re}[\psi'_p \cdot \psi^*]. \quad (7)$$

Оптимизация начинается с заданной начальной точки (начальных значений оптимизируемых параметров). В результате оптимизации находится некоторый локальный минимум оптимизируемого функционала (6). Алгоритм оптимизации не гарантирует, что это будет глобальный минимум. Поэтому обычно приходится многократно решать задачу поиска минимума для разных начальных значений оптимизируемых параметров. Поэтому можно говорить о семействе решений. Наличие семейства решений вместо одного точечного способствует решению поставленной задачи.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант: 20-37-90129).

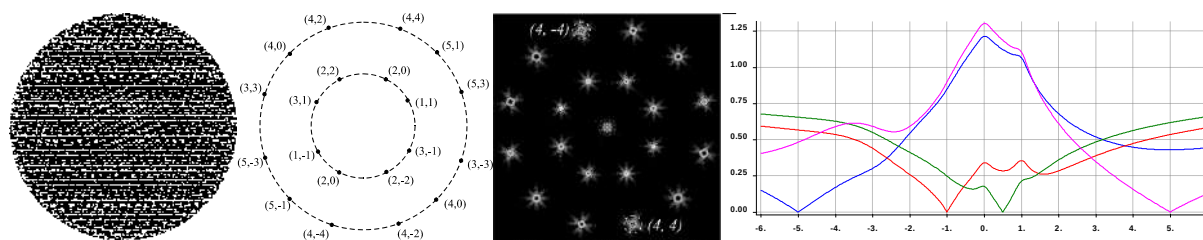


Рис. 1. Показаны: фазовая функция 20-порядкового ДОО, согласованного с функциями Цернике; соответствие номеров функций Цернике расположению дифракционных порядков; результаты формирования комбинированной картины ФРТ с помощью 20-порядкового ДОО, согласованного с функциями Цернике; Графики СКО при изменении коэффициента aberrации $Z_4^4(r, \phi)$ в случае комбинированной ФРТ для эталонных значений коэффициента $b_{44} = -5$ (синяя линия), $b_{44} = -1$ (красная линия), $b_{44} = 0.5$ (зеленая линия).

На основании полученных результатов можно сделать вывод, что использование многопорядкового (или многоканального) ДОО позволило получить больше информации об анализируемом волновом фронте на основе более сложного распределения интенсивности в фокальной плоскости. Это сложное распределение интенсивности в сочетании с алгоритмом Левенберга-Марквардта значительно улучшает сходимость процесса оптимизации. Кроме того, удалось добиться значительного увеличения области сходимости и уменьшения стандартного отклонения.

Литература

1. Born M, Wolf E. Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light. 7th ed. Cambridge: Cambridge University Press; 1999.
2. Roddier N. Atmospheric wavefront simulation using Zernike polynomials, Opt. Eng. – 1990. – Vol. 29(10). – P. 1174–1180.
3. Khonina S.N., Karpeev S.V., Porfirev A.P., Wavefront aberration sensor based on a multichannel diffractive optical element, Sensors 20, 3850–(16pp), (2020)

УДК 551.508.856

Разработка многоканального частотно-модулируемого лидара ближнего ИК диапазона

И.Ш. Газизов¹, С.Г. Зеневич¹, О.В. Бендеров¹, А.В. Родин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт космических исследований Российской академии наук

В настоящее время задачи, связанные с обнаружением беспилотных летательных аппаратов (БПЛА) в городских условиях, приобретают все большую актуальность. Применение систем на основе лидаров для детектирования спутного следа, образующегося при движении БПЛА, является одним из способов решения описанных задач. Существенным недостатком работы коммерческих ветровых лидаров является длительное время измерений, связанное с необходимостью сканирования интересующей области. Решением данной проблемы может стать создание многоэлементного изображающего лидара [1].

В данной работе представлено описание концепта многоканального изображающего лидара для измерения спутного следа БПЛА. Основной особенностью инструмента является применение РОС-лазеров, а также одномодового оптического волокна для создания оптической схемы, что позволяет значительно сократить стоимость устройства, а также время на его производство. Характеристики многоканального лидара оценены на основе экспериментов с прототипом одноканального лидара, состоящим из фиксированной линии задержки и блока электроники на основе ПЛИС. Результатом данного проекта станет матричный приемник 8x2 с блоком обработки данных для представления информации о расстоянии и скорости ветра в реальном времени.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 19-29-06104 (Родин А.В., Газизов И.Ш., Спиридонов М.В.)).

Литература

1. *Martin A. et al.* Photonic Integrated Circuit-Based FMCW Coherent LiDAR // *Journal of Lightwave Technology*. 2018. V. 36. N. 19. P. 4640-4645.

УДК 551.508.856

Совершенствование неинвазивных методов ранней диагностики меланомы кожи

В.С. Лазарь

Самарский государственный медицинский университет

Меланома кожи - одно из самых агрессивных злокачественных новообразований, которое поражает все возрастные категории населения, включая людей молодого, трудоспособного возраста. Успех лечения меланомы, а, следовательно, и продолжительность жизни, напрямую зависит от ее своевременной диагностики. Учитывая особенности меланомы, связанные с опасностью инвазивного исследования, и низкую точность диагностирования в первичном звене, появляется необходимость разработки неинвазивных, безопасных и в то же время высокоточных методов оценки новообразований кожи.

Целью исследования является улучшение показателей раннего выявления меланомы кожи и увеличение продолжительности жизни у пациентов с данным диагнозом с помощью совершенствования неинвазивных методов ранней диагностики.

Был проведен ретроспективный анализ 42 историй болезни пациентов с гистологически верифицированной меланомой кожи и 62 историй болезни пациентов с доброкачественными новообразованиями кожи за 2017-2018 гг., в Самарском областном клиническом онкологическом диспансере. В план обследования обеих групп пациентов входило: цифровая дерматоскопия, оптическая когерентная томография, флуоресцентная спектроскопия и гиперспектральная визуализация.

Оценка кожных образований при использовании цифровой дерматоскопии проводилась по алгоритму ABCDE, предложенным Kittler, где оценивались: асимметрия, граница, цвет, диаметр и динамика изменений образования. Далее с помощью оптической когерентной томографии воссоздавалось изображение поперечного среза исследуемых участков кожи *in vivo*. Флуоресцентная спектроскопия позволила вычислить и сравнить индекс накопления фотосенсибилизатора в новообразовании и окружающей ткани. Гиперспектральная визуализация применялась для исследования обратного рассеяния в видимой области спектра (520-670нм). Для дифференциации меланомы кожи, меланоцитарных невусов и нормальной кожи с помощью данного метода был введен индекс D, значение которого ниже -0,4 соответствуют меланоме кожи, в пределах от -0,4 до 0 – невусу, выше 0 – нормальной коже.

В результате исследования было выявлено, что чувствительность, специфичность и точность цифровой дерматоскопии составила 88,05%, 84,49%, 88,05% соответственно, оптической когерентной томографии – 84,3%, 89,3%, 87,8%, флуоресцентной спектроскопии – 87,2%, 88,1%, 94,8%, гиперспектральной визуализации – 95,9%, 92,5%, 96,3%.

Таким образом, с помощью предложенных методов ранней неинвазивной диагностики меланомы кожи можно добиться уже на поликлиническом этапе высокой точности в постановке диагноза, без привлечения высококвалифицированных специалистов, что в дальнейшем приведет к улучшению показателей продолжительности и качества жизни пациентов, снижению числа летальных исходов и уменьшению затрат на лечение запущенных стадий.

Литература

1. Братченко И.А., Алонова М.В., Мякинин О.О., Морятков А.А., Козлов С.В., Захаров В.П. Гиперспектральная визуализация патологий кожи в видимой области// *Аспирантский вестник Поволжья*. – 2016 – № 1-2. – С. 164-166.

Спектральные свойства атомов, локализованных в импульсной оптической дипольной ловушке

А.А. Кортель^{1,2}, А.Е. Афанасьев^{1,2}, А.М. Машко^{1,2}, В.И. Балыкин¹

¹Институт спектроскопии Российской академии наук

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Локализация нейтральных атомов с использованием дипольной силы лежит в основе многих подходов фундаментальной и прикладной физики. В последние годы активно развивается использование таких систем в области квантовых технологии, включая квантовые сенсоры [1]. Важным аспектом в данном направлении является влияние локализирующего потенциала на свойства квантовой системы. Одним из направлений уменьшения влияния локализирующего потенциала является использование импульсного взаимодействия атомов с электромагнитным полем, формирующим дипольную силу. Предельным случаем использования импульсного взаимодействия атома с локализирующим полем является использование лазерного излучения фемтосекундной длительности для формирования требуемого потенциала локализации. Данный подход был предложен в работах [2, 3].

Локализация атомов импульсным полем фемтосекундной длительности была недавно экспериментально продемонстрирована в Лаборатории лазерной спектроскопии Института спектроскопии РАН [4]. Это позволило начать исследования спектральных свойств атомов локализованных в дипольной ловушке сформированной импульсным лазерным излучением. В данной работе представлены предварительные результаты таких исследований.

На рисунке 1 представлены зависимости относительных потерь атомов от частоты пробного поля, измеренные для ловушек, образованных как импульсным, так и непрерывным излучением. Было обнаружено, что спектральные характеристики атомов, локализованных полем импульсного лазерного излучения фемтосекундной длительности и непрерывным лазерным излучением – идентичны (при условии равенства интенсивностей используемых лазерных полей). Как и в случае использования непрерывного лазерного излучения, при использовании импульсного излучения наблюдается сдвиг и уширение спектральной линии поглощения на исследуемом переходе $^{85}\text{Rb } 5S_{1/2}(F=3) \rightarrow 5P_{3/2}(F'=4)$.

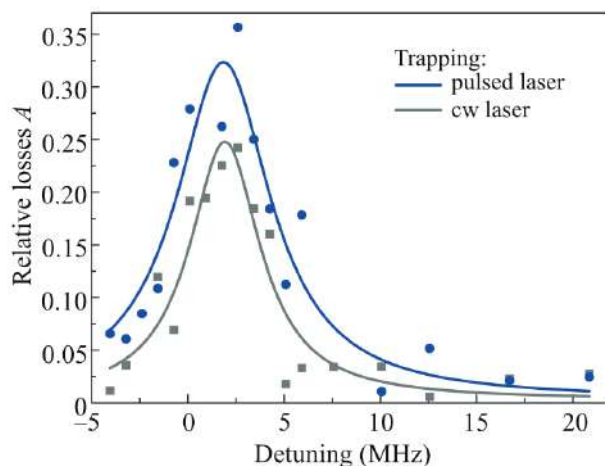


Рис.1. Спектроскопия атомов, локализованных полем непрерывного излучения (CW laser) и полем лазерных фемтоимпульсов (pulsed laser)

Также, теоретический анализ показывает, что при использовании некоторых параметров импульсного излучения, таких как средняя интенсивность и длительность импульса, возможна реализация режима локализации атома, при котором сдвиг линии отсутствует [5]. Помимо этого, в работе показано, что населенность возбужденного состояния (а значит, и спектр поглощения атома) зависит от обоих этих параметров: при увеличении интенсивности локализирующего поля (что эквивалентно увеличению глубины ловушки) происходит сдвиг линии поглощения пробного лазерного излучения в голубую область спектра. При этом, начиная с некоторой интенсивности лазерного поля, в спектре поглощения наблюдаются две линии.

Литература

1. Grimm R., Weidemuller M. and Ovchinnikov Y. B., "Optical dipole traps for neutral atoms", Adv. At. Mol. Opt. Phys., 42, 95 (2000).
2. Balykin V. I., "Motion of an Atom under the Effect of Femtosecond Laser Pulses: From Chaos to partial Localisation", JETP Letters, Vol. 81, 209, (2005).
3. Yanyshchuk D.N., Balykin V.I., Vladimirova Y.V., and Zadkov V.N., "Dynamics of atoms in a femtosecond optical dipole trap", Phys. Rev. A, 87, 033411 (2013).
4. Afanasiev A. E. et al. Atom femto trap: experimental realization //Applied Physics B. – 2020. – Т. 126. – №. 2. – С. 1-7.
5. Afanasiev A. E. et al. Spectroscopy of Rubidium Atoms in a Femtosecond Pulsed Optical Dipole Trap //JETP Letters. – 2020. – Т. 111. – №. 11. – С. 608-612.

УДК 543.424.2

Спектральная оценка состояния тканей зубов при пародонтозе

Е.В. Тимченко¹, П.Е. Тимченко¹, М.А. Зыбин², О.О. Фролов¹, Л.Т. Волова³, Ю.Д. Итяков¹

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва

²Стоматологическая клиника «Диамант»

³Самарский государственный медицинский университет

Пародонтоз регистрируется у 1-8% людей и протекает без выраженных симптомов воспаления. Кость со временем медленно рассасывается, оголяются корни зубов и вследствие чего зубы выглядят удлиненными и резко реагируют на воздействие холода, тепла и химических раздражителей. В последней стадии заболевания происходит рассасывание альвеолы зубов, которое происходит в сочетании с воспалением десен. В результате этого зубы расшатываются и выпадают [1]. Поэтому своевременное диагностирование и лечение пародонтоза является важной медико-биологической задачей.

Спектроскопические методы считаются сегодня наиболее перспективными в современной неинвазивной оптической диагностике, прежде всего в медицине. Этот метод используется как инструмент мониторинга динамики процессов, протекающих в тканях, предоставляет уникальные возможности для изучения возбужденных состояний молекул, фотохимических реакций, структуры и свойств сложных химических и биологических объектов [2].

В данной работе метод спектроскопии комбинационного рассеяния был применен для оценки состояния тканей зубов при пародонтозе. В качестве материала для исследования использовались образцы зубов человека, удаленные по различным пародонтальным показаниям (обнажение корня зуба более 2/3, атрофия костной ткани в области зуба более 2/3 и др.), возраст пациентов составлял 40-55 лет, а контрольные образцы зубов человека удаляли по ортодонтическим показаниям. Образцы исследования обрабатывали раствором "Альмадез экспресс" методом погружения, затем помещали в морозильную камеру и доставляли в течение 30 минут к месту исследования. Исследование тканей зубов проводилось с помощью стенда, реализующего метод рамановской спектроскопии [3].

Был проведён анализ взаимосвязи групп объектов по признакам принадлежности к определённой области зуба.

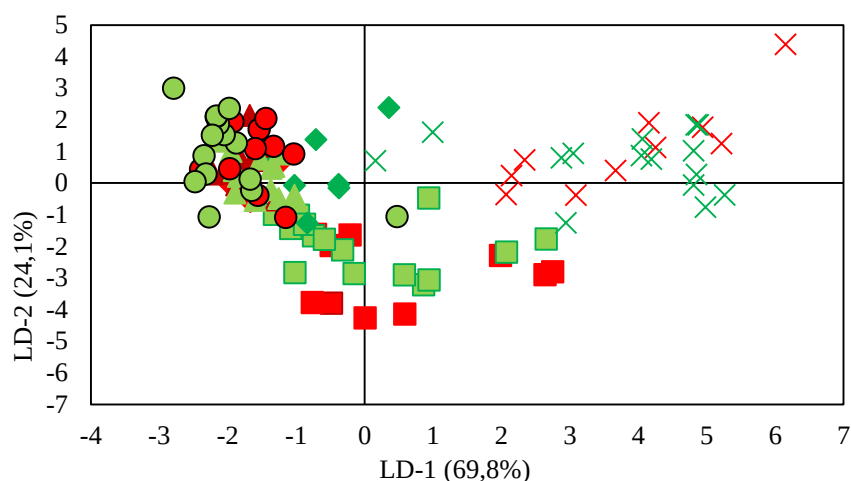


Рис.1. График значений линейных дискриминантных функции для образцов зубов, разделение по исследуемым зонам: красным цветом обозначены области зубов, пораженные пародонтозом, а зеленым – области зубов, соответствующие здоровым зубам: ромб – дентин корня, квадрат – дентин коронковой части зуба, треугольник – поверхность на уровне оголения десны, круг – цемент, крестик – эмаль

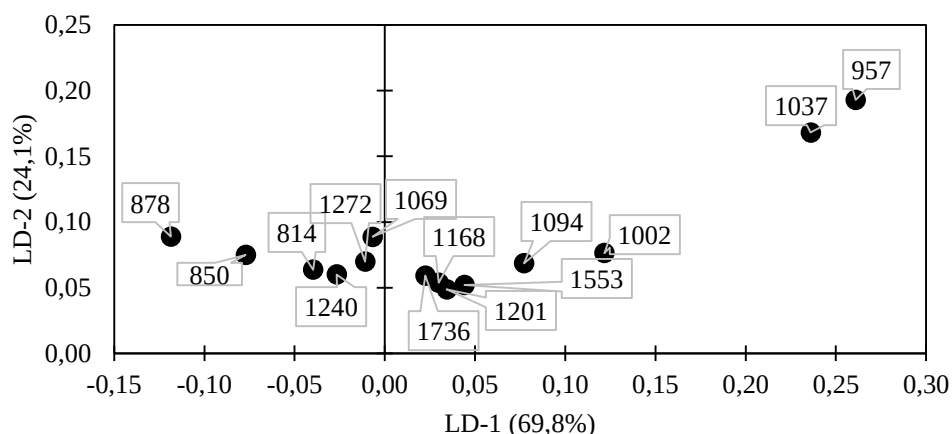


Рис.2. График значений нормированных коэффициентов канонических дискриминантных функций

Из анализа рисунков 1-2 видно, что значимых спектральных изменений для эмали между здоровыми группами и группами с диагнозом пародонтоз не наблюдается.

В тоже время, в дентине коронковой части зуба, при пародонтозе, основные изменения происходят на линиях КР 850 см^{-1} (пролин), 878 см^{-1} (гидроксипролин) и 957 см^{-1} (Р-О симметричное валентное колебание $\text{PO}_4^{3-}(\nu_1)$ гидроксиапатита), что по-видимому связано с изменением коллагеновых и минеральных структур при заболевании.

В цементе и дентине корня все спектральные изменения проявляются в основном на линиях 850 см^{-1} (пролин) и 878 см^{-1} (гидроксипролин), что соответствует изменению состава коллагеновых структур при пародонтозе. Это связано с тем, что дентин корня и цемент характеризуются меньшей минерализацией и большим содержанием коллагеновых фибрилл, чем коронковая часть дентина, а также при пародонтозе происходит интенсивное отложение коллагеновых волокон и аморфного склеивающего вещества цемента, что также приводит к изменению органической составляющей тканей зубов. Поэтому спектральные изменения в цементе и дентине корня проявляются лишь в изменении органической составляющей зуба.

Установлено, что метод спектроскопии комбинационного рассеяния может быть в дальнейшем применен для оценки степени поражения тканей зубов при пародонтозе, в стоматологической практике.

Литература

1. Емелина Е.С., Палыйкина В.В., Никонова А.В., Капранова Г.А. Принципы лечения пародонтоза //Современные тенденции развития науки и технологий. 2016. № 11-5. С. 31-33

2. Global, regional, and national incidence, prevalence, and years lived with disability for 354 diseases and injuries for 195 countries and territories, 1990–2017: a systematic analysis for the Global Burden of Disease Study 2017. *Lancet* 2018; 392: 1789–1858
3. Timchenko E.V.; Timchenko P.E., Frolov O.O., Yagofarova E.F., Chernyy-Tkach K.B., Zybin M. A., Dolgushov G.G. Optical Methods for Periodontitis Early Rapid Diagnosis // *Electrical Engineering and Photonics (EEExPolytech)*, IEEE 2019, 978-1-7281-4439-9/19 - C.298-300 DOI: 10.1109/EEExPolytech.2019.890680

УДК 535.8

Спектр комбинационного рассеяния света тонких пленок оксида цинка, нанесенных при разных температурах

Л.П. Выломов, Ф.В. Подгорнов

Южно-Уральский государственный университет

Оксид цинка ZnO является широкозонным полупроводником ($\Delta E_g = 3,37$ эВ), обладающим одной из самых больших энергий связи экситонов (≈ 60 мэВ), что делает перспективным его применение при создании компонентной базы электроники, в частности, ультрафиолетовых светодиодов.

В настоящее время известно несколько технологий изготовления тонких пленок оксида цинка, самой доступной из которых является оксидирование тонких пленок цинка, нанесенных на подложку. Одной из проблем, возникающих при использовании данной технологии, является возникновение внутрипленочных механических напряжений приводящих к изменению параметров и свойств пленок оксида цинка. Наиболее эффективным методом оценки величины механических напряжений и их пространственного распределения является спектроскопия комбинационного рассеяния света.

Целью данной работы является оценка влияния температуры стеклянной подложки при нанесении пленок цинка на величину механических напряжений в пленках ZnO методом комбинационного рассеяния.

Данный метод основан на том, что разность характерных частот спектральных линий $\Delta\omega$ в спектре комбинационного рассеяния линейно зависит от механического напряжения (σ):

$$\Delta\omega = k\sigma, \quad (1)$$

где k – коэффициент пропорциональности.

В рамках данной работы исследовались пленки ZnO (толщина 40 нм), полученные окислением пленок цинка, изготовленные электроно-лучевым методом при разных температурах стеклянных подложек (при температуре подложки 28°C и 100°C во время изготовления), исследование проведено на спектрометре комбинационного рассеяния света NT-MDT Integra Spectra на длине волны возбуждающего излучения 472,8 нм.

Спектры исследуемых тонких пленок ZnO имеет только один пик, максимум которого расположен около 444 см^{-1} , что соответствует вкладу атома кислорода. Наблюдается смещение спектрального положения данного пика рис. 1. Данный факт свидетельствует о наличии механического напряжения в тонкой пленке оксида цинка. К сожалению, исследование тонких пленок ZnO 100°C затруднено, поскольку не виден ее пик на спектре из-за фотолюминесценции.

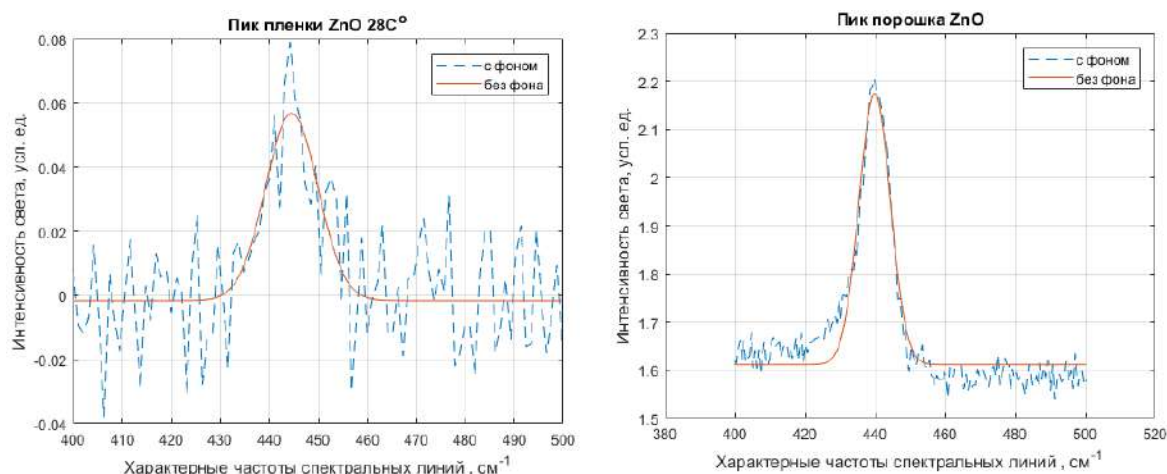


Рис. 1. Пики тонкой пленки ZnO 28°C (444 см⁻¹) и порошка ZnO (440 см⁻¹).

Литература

1. Nazari M., Holtz M.W. Near-ultraviolet Raman and micro-Raman analysis of electronic materials // Applied Physics Reviews 2018. V. 5. P. 041303.
2. Beechem T., Graham S., Kearney S.P., Phinney L.M., Serrano J.R. Invited Article: Simultaneous mapping of temperature and stress in microdevices using micro-Raman spectroscopy // Rev. Sci. Instrum. 2007. V.78. P. 061301

УДК 535.8

Спектроскопия квантовых биений в системе 3 одинаковых, близко расположенных атомов

А.И. Мохов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Институт спектроскопии РАН
Сколковский институт науки и технологий

Для трёх близко расположенных локализованных щелочноземельных атомов рассмотрены возможности метода квантовых биений (вариант спектроскопии пересечения уровней в магнитном поле) в нахождении параметров, характеризующих систему. Были рассмотрены три конфигурации: «string», «shift», «triangle» - представляющие собой линейное эквидистантное и неэквидистантное расположения, а также расположение в вершинах равнобедренного треугольника.

Предполагается, что основное состояние атома не вырождено (полный угловой момент $J = 0$), а возбужденное становится трёхкратно вырождено (полный угловой момент $J = 1$, с проекциями момента на ось квантования $M = -1, 0, 1$).

Для запутанных состояний были построены графики энергий, получаемых из решения уравнений Шрёдингера [1]. На значение энергий влияют эффект Зеемана и диполь-дипольное взаимодействие между атомами.

В случае конфигурации «string» были обнаружены антипересечения уровней энергии состояний, при отклонении направления магнитного поля от линии, на которой расположены атомы. Таким образом, при изменении направления магнитного поля, может быть обнаружено такое, при котором, на диаграмме распада не будет видно квантовых биений. Это и будет линия, соединяющая атомы. Ниже приведён график, иллюстрирующий зависимость минимально различимого угла от величины характерного расстояния между атомами (рис. 1). Так же, в системе, определяется расстояние между атомами, по методу, описанному в [2].

Для системы «triangle» тоже характерны антипересечения состояний. Основным принципом, которым следует руководствоваться, это увеличение энергетического зазора между состояниями при увеличении угла при основании треугольника. В качестве зависимой величины взято отношение времени распада возбужденного состояния к периоду колебаний (иными словами, количество колебаний, уместающееся на графике флуоресценции) (рис. 2).

Для системы «shift» метод антипересечения уровней не может быть применён, так как при смещении центрального атома в сторону одного из крайних характер картины спектров меняется,

как если бы было простое масштабирование системы (при разумных смещениях), однако, можно построить зависимость положения опорных точек (значения эффекта Зеемана в точке пересечения), при различных смещениях центрального атома (в процентах) (рис. 3). Во избежание разночтений используется калибровочная точка пересечений, значение энергии в которой пренебрежимо слабо меняется с увеличением смещения.

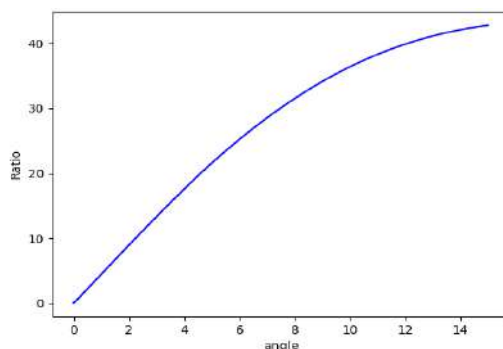


Рис. 1. Зависимость минимально различимого угла от расстояния между атомами (в единицах длины волны падающего света)

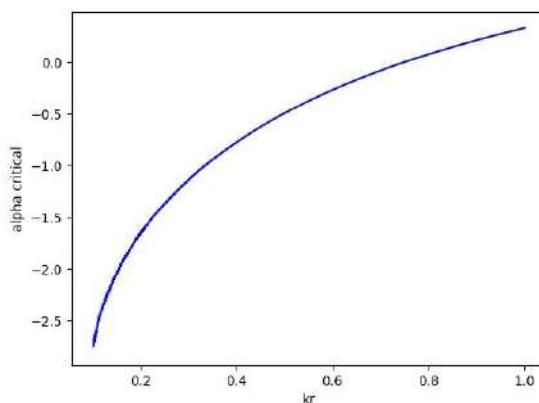


Рис. 2. Зависимость количества колебаний интенсивности от α

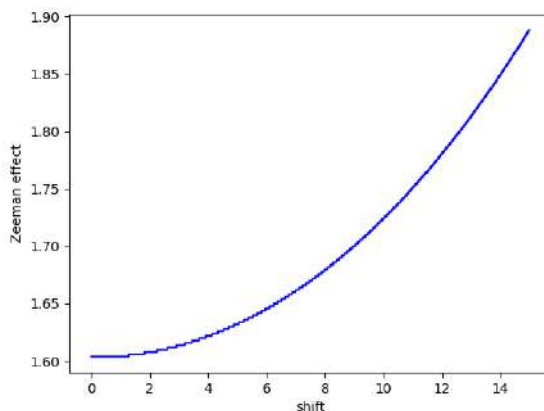


Рис. 3 Зависимость положения опорной точки от величины смещения

Литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Квантовая механика, нерелятивистская теория, Теоретическая физика. Т. 3. М.: Физматгиз. 1963.
2. Мохов А.И., Макаров А.А. Спектроскопия квантовых биений в системе N одинаковых, близко расположенных атомов. I. Случай N=2. // Оптика и спектроскопия 2019, Т.127 №7 С.13-19

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

Дата: 28.11.2020 Время: 11:00

УДК 534.32

Акустика и звуковое восприятие множественного соударения

А.Д. Сухов, Д.В. Спинов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

При множественном соударении двух тел образуется характерный звук, который в зависимости от времени между соударениями может при обработке сигнала (человеческим ухом или Фурье преобразованием) определяться как отдельные удары или как одна выделенная частота. Примером такого взаимодействия является множественное соударение стаканов, зажатых между пальцами. Данная задача была предложена на международном студенческом турнире физиков. В данной работе рассматривается механический аспект такого взаимодействия и акустическая проблема обработки звукового сигнала. Потери энергии при соударении были рассмотрены в контактной эмпирической модели трения Палмгрена [1], благодаря чему удалось описать уменьшение времени между соударениями в модели негармонических затухающих колебаний (Рис. 1), а также динамику соударяющихся тел (Рис. 2), что было проверено в ходе сравнения теоретического предсказания с экспериментом. Экспериментальная установка поддерживала видео, аудио и электрический (при соударении стаканов замыкалась электрическая цепь) анализ соударений (Рис. 3).

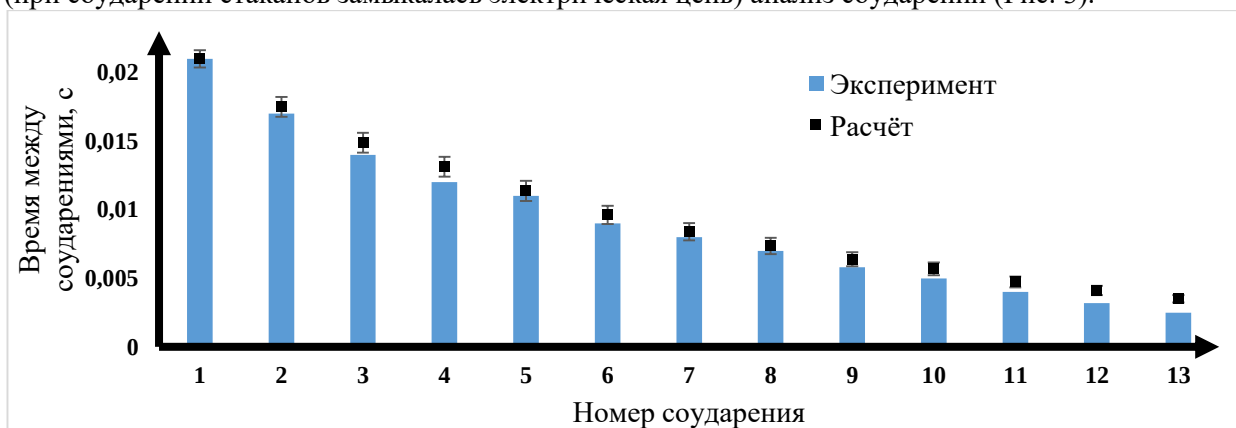


Рис. 5. Время между соударениями от номера первого из соударений. Сравнение расчёта и эксперимента.

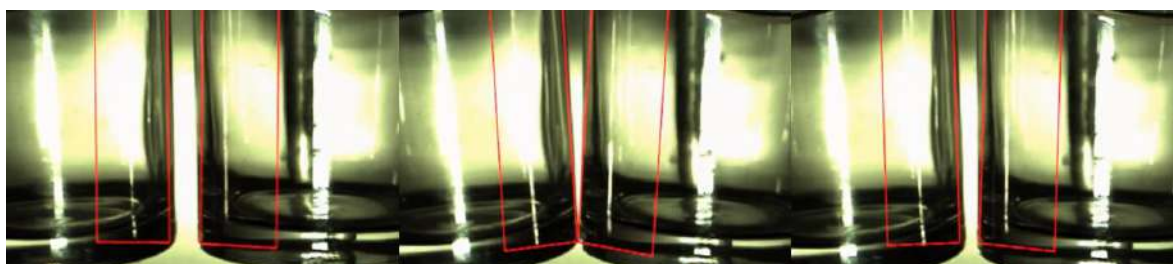


Рис. 2. Сравнение динамики. Эксперимент (6000 fps) и моделирование (красные прямоугольники).



Рис. 3. Экспериментальная установка. Съёмка на камеру до 80 тысяч кадров в секунду, запись звука с частотой дискретизации 44,1 кГц, запись сигнала с осциллографа при соударении с частотой дискретизации до 100 МГц.

Распространение звуковой волны после соударения двух тех рассматривалось во многих научных работах [2-4], на основе этих результатов была определена зависимость для выделенной частоты осциллятора. Помимо этого, было проведено численное моделирование собственных частот стакана в программе COMSOL Multiphysics (Рис. 4).

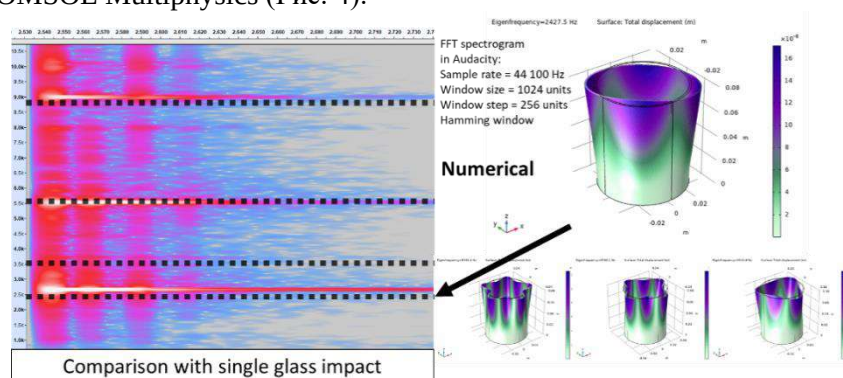


Рис. 4. Сравнение собственных частот системы. Моделирование и экспериментальная спектрограмма.

Описав механику соударений и акустику одного удара, был смоделирован весь звуковой сигнал и его характеристики были сравнены с экспериментом. Частотный анализ подобного звука сильно зависит от временного окна преобразования Фурье, что определяет момент, когда мы перестаём различать отдельные удары и определяем их как одну выделенную частоту, в частности и человеческим ухом. В литературе описывают алгоритмы обработки сигнала в ушной раковине человека [5], также было проверено временное окно такого преобразования в психоакустическом эксперименте, был проведен опрос, в котором было выяснено время, с которого опрошенные слышат повышение частоты. Именно наличие аналога временного окна создаёт описанный эффект.

Авторы работы выражают благодарность Черкасову А.М., Бочкову М.А., Червинской А.С., Мельниковскому Л. А., Виноградову С.В., Федорову Г.Е., Светличному А.О., Вановскому В.В за замечания.

Литература

1. Harris T.A. and Kotzalas M.N., Rolling bearing analysis, New York, NY: Wiley (2001).
2. Yufang W. and Zhongfang T., Sound radiated from the impact of two cylinders, Journal of Sound and Vibration, 159 (2) (1992) 295-303.
3. Yinggang Li* [et al.], Theoretical and numerical investigation on impact noise radiated by collision of two cylinders, Journal of Mechanical Science and Technology, 28 (6) (2014) 2017~2024
4. K. Mehraby [et al.], Impact noise radiated by collision of two spheres: Comparison between numerical simulations, experiments and analytical results, Journal of Mechanical Science and Technology, 25 (7) (2011) 1675~1685

5. Lyon R. F., Human and Machine Hearing. Extracting Meaning from Sound., Cambridge, 2017, 599, ISBN 978-1-107-00753-6

УДК 535.015

Влияние длины волны лазерного излучения на наведенное поглощение лазерного излучения органическими соединениями фталоцианинового ряда в твердотельной матрице композит нанопористое стекло полимер при наносекундной длительности лазерного импульса

М.Ф. Колдунов¹, Л.М. Колдунов^{1,2}, А.А. Корнева¹, А.Л. Шилов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²АНОО «Физтех-лицей» им. П.Л. Капицы

Наведенное поглощение органических соединений активно исследуется, начиная с 80х годов. Эти исследования имеют как фундаментальное значение, как один из вопросов взаимодействия лазерного излучения с веществом, так и практическое применение, а именно создание различных изделий лазерной техники таких как ограничители мощности лазерного излучения, оптические переключатели и т.д.

С точки зрения практического применения важно, чтобы оптический элемент был твердотельным. Для органических соединений такое требование является трудновыполнимым, что органические соединения начинают разрушаться при температурах порядка 100°C. Одна из матриц, которая позволяет обойти это ограничение является твердотельная матрица композит нанопористое стекло полимер. Введение вещества в твердотельную матрицу может изменить его фотофизические свойства (могут измениться скорости безызлучательных переходов, сечения поглощения и т.д.), что может привести к изменению эффективности наведенного поглощения. По этой причине необходимы дополнительные исследования как фотофизических свойств органических соединений в твердотельной матрице, так и наведенного поглощения.

Хорошо известно¹, что эффективность наведенного поглощения зависит от сечений поглощения лазерного излучения из основного и возбужденных состояний. Сечение поглощений, в свою очередь, зависит от длины волны лазерного излучения. Ранее², такие исследования были выполнены для фталоцианиновых соединений на длине волны 532 нм, однако эти органические соединения ранее не исследовались на других длинах волн. В данной работе представлены результаты исследований соединений фталоцианинового ряда в видимом диапазоне излучения наносекундной длительности, а также анализ этих результатов. Представлена зависимость как параметра контраста наведенного поглощения, так и критической интенсивности от длины волны лазерного излучения.

Литература

1. J.W. Perry, K. Mansour, S.R. Marder, K.J. Perry, Jr. D. Alvarez, I. Choong, Enhanced reverse saturable absorption and optical limiting in heavy-atom-substituted phthalocyanines, Opt. Lett. 1994. V. 19, P. 625 – 627.
2. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=23452448>

УДК 621.384, 579.65

Гамма мониторинг поглощенной дозы импульсного пучка протонов при флэш терапии

В.М. Скоркин

ФГБУН Институт ядерных исследований РАН

Исследован мониторинг поглощенной дозы импульсного пучка протонов с помощью регистрации радиационного гамма излучения при облучении культур клеток для измерения эффективности флэш терапии (поражения раковых клеток мощными короткими импульсами частиц). Регистрация фотонов от взаимодействия пучка протонов с биологической тканью можно использовать как метод контроля клинической поглощенной дозы при протонной терапии [1,2].

Проведено облучение водного фантома с клетками импульсным пучком протонов линейного ускорителя длительностью 20-120 мкс и током 4-9 мА. Мониторинг радиационного гамма излучения от взаимодействия протонов с биологическим материалом осуществлялся вблизи фантома в процедурной протонной терапии в режиме реального времени с помощью гамма детекторов БДМГ-41 и БДМГ-08. В режиме реального времени были измерены мощность дозы гамма излучения от взаимодействия импульсного пучка протонов с материалом фантома и образцов с клетками при различных частотах, длительности и токе пучка. Всего было проведено измерения с 18 образцами. Дополнительно проведено измерение потоков быстрых нейтронов детекторами нейтронов типа БДН-02. Временная диаграмма уровней гамма излучения, измеренных гамма детектором БДМГ-08 на расстоянии 5 м от фантома в единицах мощности эквивалентной дозы приведена на рис. 1. Видно, что наблюдается корреляция мощности дозы гамма и нейтронных излучений при различных условиях облучения и параметрах импульсного пучка. С помощью гамма детектора регистрировался также гамма фон от активированного протонами пучка материала водного фантома.

Поглощенная доза протонов импульсного пучка в облучённых клетках измерялась с помощью радиохромной плёнки Gafchromic EBT2, которая размещалась в образце рядом с клетками. Поглощенная клетками доза импульсного пучка протонов коррелирует с измеренной дозой гамма и нейтронного излучений. На рис. 2 приведена линейная зависимость поглощенной дозы протонов клетками в зависимости от эквивалентной дозы гамма излучения при различных измерениях и параметрах пучка. Там же приведены зависимости дозы нейтронного излучения, измеренного разными детекторами на разных расстояниях от фантома. При большой интенсивности пучка протонов были введены коллиматоры, уменьшающие облучение клеток и поглощенную дозу (рис. 2). Таким образом, измеряя дозу радиационного излучения можно контролировать поглощенную дозу пучка протонов при облучении биологических образцов.

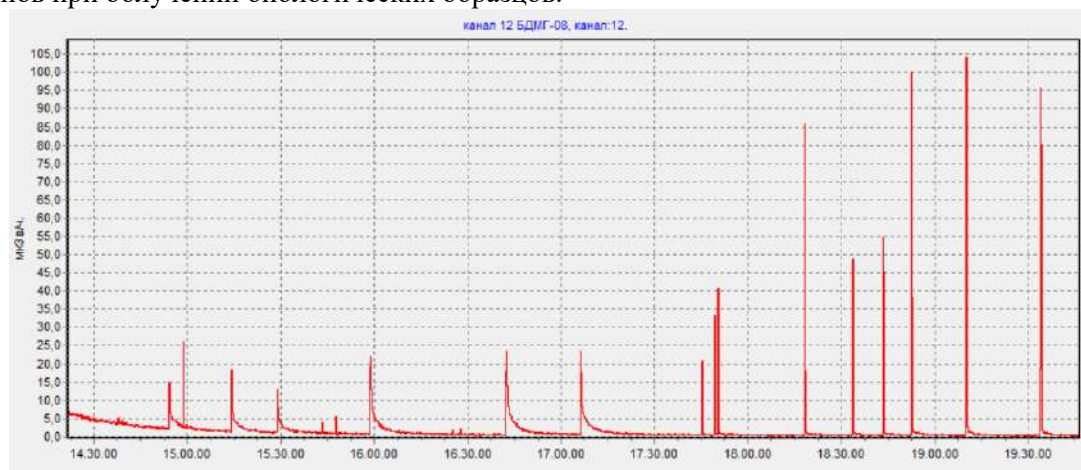


Рис. 1. Временная диаграмма уровней гамма излучений в единицах мощности эквивалентной дозы мкЗв/ч.

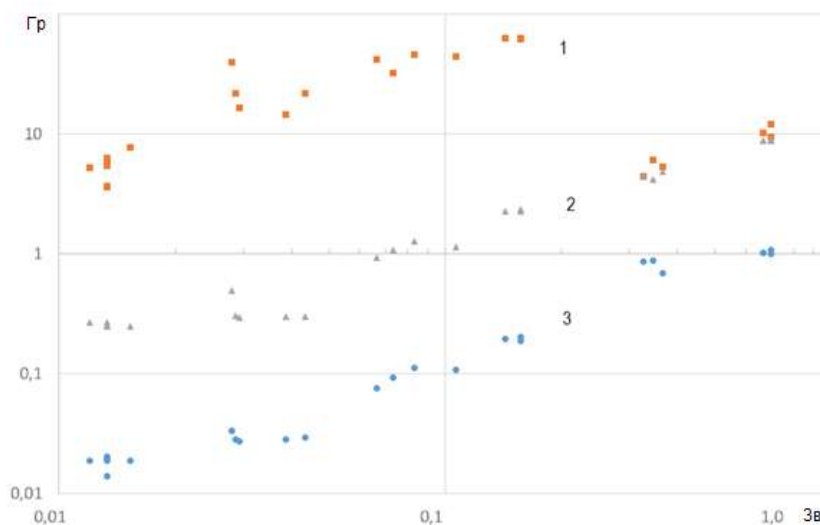


Рис. 2. Линейная зависимость поглощенной дозы протонов клетками (1) и дозы нейтронов (2,3) от дозы гамма излучения

Литература

1. Hueso-González F., Rabe M., Ruggieri T. et al. A full-scale clinical prototype for proton range verification using prompt gamma-ray spectroscopy // Phys. Med. Biol. 2018. V. 63. P. 185019.
2. Xie Y., Bentefour E.H., Janssens G. et al. Prompt Gamma Imaging for In Vivo Range Verification of Pencil Beam Scanning Proton Therapy // Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys. 2017. V. 99. P. 210.

УДК 66.083.2

Интерференционные явления в осмотических системах на мембранах с субнаноразмерными порами

А.Д. Тропина, А.Ю. Осичева, Я.А. Гордеев, А.Г. Лапушкин, Г.И. Лапушкин,
В.Ю. Стожков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время для процессов нанофильтрации растворов и обратного осмоса повсеместно используются тонкопленочные композитные мембраны с полиамидным барьерным слоем толщиной порядка 200 нм, нанесенным на полисульфоновую или ацетатцеллюлозную основу. Порами в таких барьерных слоях являются дефекты структуры либо деформация полимерных цепей, вызванная изменением валентных углов [1]. Размеры дефектов составляют несколько $2\div 20$ Å. Для описания осмотических процессов используются следующие модели: гипотеза молекулярно-ситового транспорта, теория диффузионного переноса вещества, капиллярно-селективная модель проницаемости [2]. Однако, в системах, с геометрическими размерами, сравнимыми с дебройлевской длиной волны проникающей частицы (для молекулы воды при комнатной температуре $\lambda_{\text{дб}} \sim \frac{h}{\sqrt{m_{\text{H}_2\text{O}} k_B T}} \cong 0,6$ Å), возможно учитывать волновые свойства движущихся через барьер частиц.

Молекулы в жидкой воде существуют в виде *многочастичных динамических кластеров* [3], в которых водородные связи образуются и рвутся в течение временного интервала $10^{-10} \div 10^{-11}$ с (модель Фрэнка и Уэна [4]). Энергия связи в такой системе оценивается как 0,5 эв/молекулу. Среди ассоциатов находятся одиночные молекулы воды, имеющие тепловую энергию, которые могут пройти через поры мембраны. Ассоциаты в связи с значительными размерами не могут участвовать в транспорте.

В ходе измерений прямого осмотических явлений в растворах гексацианоферрата (II) калия [5] наблюдались осцилляции вблизи равновесного значения давления $\Delta P \approx 200$ Па. Для подтверждения результатов и исключения влияния измерителя-регулятора ОВЕН ТРМ-202 на показания преобразователя давления были проведены измерения временной зависимости напряжения на сопротивлении номиналом 100 Ом при подключении преобразователя давления в режиме токовой петли с использованием вольтметра В7-78. Период осцилляций составил примерно 1,7 сек (рис.1).

Так как изменение потенциала U_3 происходит крайне медленно в сравнении с временем прохождения частицы через мембрану, процесс можно описать стационарным уравнением Шредингера. Транспорт молекул воды через мембрану рассматривается как прохождение над потенциальным барьером, высота которого принимается равным разности химических потенциалов газообразной и жидкой воды $\Delta\mu = \mu_{\text{п}} - \mu_{\text{ж}} \approx 0,9$ эв. Учитывая, что в изотермических процессах $d\mu = vdp$, где $v \approx 3 \cdot 10^{-23}$ см³ – молекулярный объем воды, то в области III (рис.2) $\mu_{\text{p-ра}}(t) = \mu_{\text{p-ра}}(0) - vP(t)$, или $\mu_{\text{p-ра}}(t) = \mu_0 - v(P_{\text{осм}} - P(t))$. Существенно упрощает выражения для энергетического коэффициента барьера D то обстоятельство, что вблизи равновесного давления $v(P_{\text{осм}} - P(t)) \ll vP_{\text{осм}} \approx 10^{-6}$ эв $\ll P_{\text{осм}}$. Выбирая за ноль отсчета значение потенциала в области III и, допуская, $E \sim \Delta\mu$, можно получить следующее выражение:

$$D = \left[\frac{\Delta\mu}{4v(P_{\text{осм}} - P(t))} \sin^2 \left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} d \sqrt{v(P_{\text{осм}} - P(t))} \right) + 1 \right]^{-1} \quad (1)$$

где d – толщина мембраны, m – масса молекулы воды.

В выражении (1) множитель $\frac{\Delta\mu}{4v(P_{\text{осм}}-P(t))} \gg 1$, так что D отличен от нуля только при условии $\frac{2md^2}{\hbar^2} v\Delta P = \pi^2 n^2$, тогда период колебаний может быть оценен как $T = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mvd^2} \left(\frac{dP}{dt}\right)^{-1}$. В экспериментах вблизи равновесного давления значение $\left(\frac{dP}{dt}\right) = 50 \frac{\text{дин}}{\text{см}^2\text{с}}$. Принимая толщину селективного полимерного слоя мембраны 0,2 мкм, оценки периода колебаний дают значение 0,9 с, которое близко к наблюдаемой величине.

Понижение давления в ячейке при наблюдаемых колебаниях можно объяснить наличием в мембране крайне небольшого количества крупных пор с пуайзелевским течением, через которые может осуществляться транспорт кластеров воды.

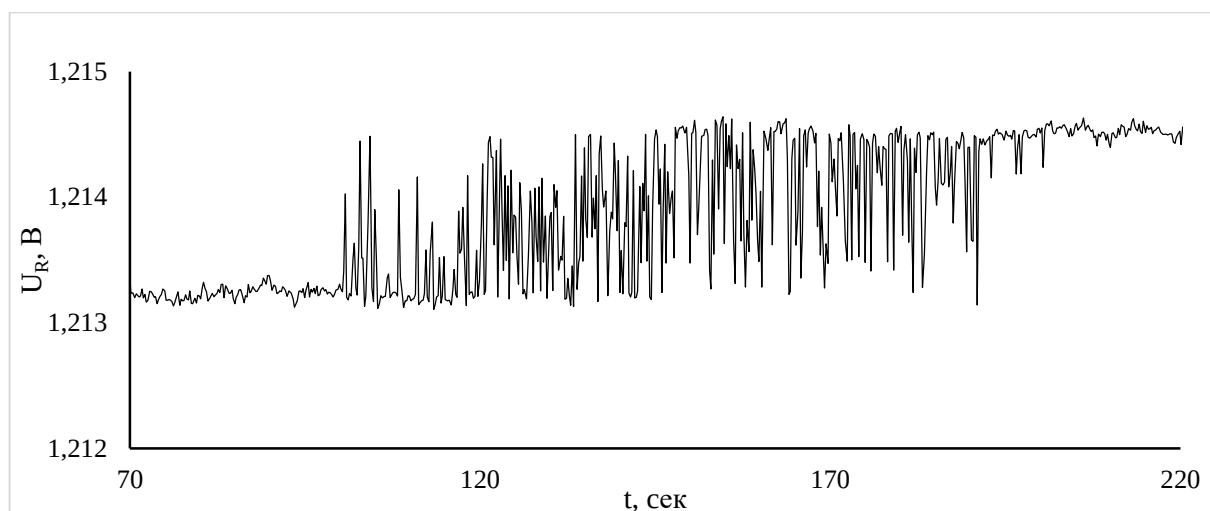


Рис.1. Временная зависимость напряжения на сопротивлении 100 Ом при подключении преобразователя давления ОВЕН ПДИ 100 (модель 121), измеряющего давление в герметичной осмотической ячейке, подключенного в режиме токовой петли 4÷20 мА. Стабилизированное напряжение питания преобразователя 24 В.

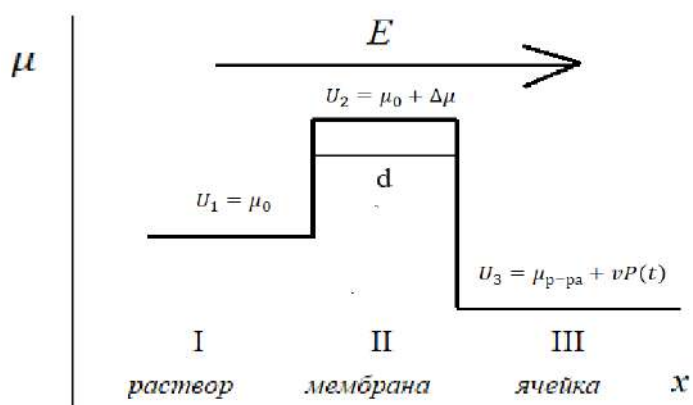


Рис. 2. Энергетическая диаграмма прохождения частицы над прямоугольным потенциальным барьером, моделирующая транспорт молекулы воды через мембрану. v – молекулярный объем воды в растворителе, $\Delta\mu$ – разность химпотенциалов водяного пара и жидкой воды, μ_0 – химпотенциал жидкой воды.

Литература

1. И.А. Ронова. О факторах, влияющих на жесткость ароматических циклоцепных полимеров // Высокомолекулярные соединения. 1995, т. 37(Б), 12, С.2049-2052.
2. Голованева Н.В. Особенности механизма и влияние основных технологических параметров на на характеристики нанофильтрационных мембран. Дисс.канд. тех. наук., М.,н/д, 2015, 156 с.
3. С.Д. Захаров, И.В. Мосягина. Кластерная структура воды (обзор). Препринт Физического Института РАН, М., 2011, 24 с.
4. J. O'M. Bockris, A.K.N. Reddy. Modern Electrochemistry. Vol 1, 2nd edn., Plenum Press, New York, 1998.

5. *Болейко Г.М. [и др.]* Определение практического коэффициента Вант-Гоффа в осмотической ячейке, содержащей раствор гексацианоферрата (II) калия// Труды 62-й Всероссийской научной конференции МФТИ (18–24 ноября 2019). Фундаментальная и прикладная физика. М.: МФТИ. 2019. С. 31-33.
6. *Стожков В. Ю., Лапушкин Г. И.* Динамика изменения избыточного давления в осмотической ячейке с утечками. Труды МФТИ. 2020, т. 12, 4(48), С. 139-144.

УДК 535.8

Интерферометрия в работе по изучению динамики искрового разряда в воздухе в промежутке острие – плоскость

Х.Т. Смазнова

Физический институт академии наук имени Лебедева

В проводимых работах было установлено, что искровой канал представляет собой скопления десятков сильно ионизованных филаментов с микронным диаметром и субнаносекундным временем эволюции (рис. 1), что представляет собой перспективный вариант реализации поджига газобразного топлива обедненного кислородом за счет быстрой ионизации в разряде в режиме филаментации. Эти работы были основаны на методе многокадрового лазерного зондирования.

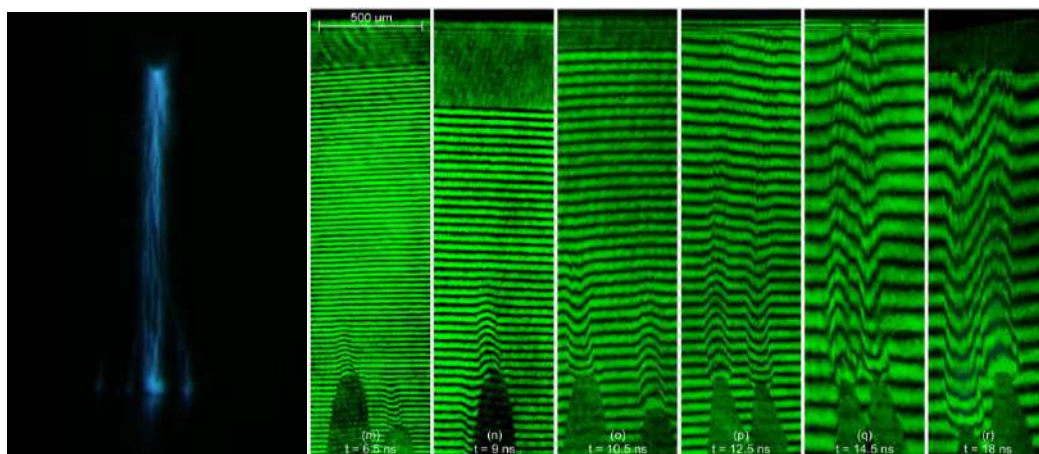


Рис. 1. Самосвечение разряда (фильтр СЗС21) и интерферограммы в различные моменты времени относительно пробоя

Самой главной задачей в проводимых экспериментах является численная обработка интерферограмм осесимметричных плазменных объектов. Следовательно, огромное значение для нашей работы играет получение качественной интерференционной картины, т.е. необходимость найти наилучший вид интерферометра для поставленной задачи и произвести очень точную настройку. В данной работе было решено использовать интерферометр с применением воздушного клина. Интерференция возникает в результате суперпозиции двух лазерных лучей, отраженных от граней воздушного клина, который находится в зазоре между двумя прижатыми друг к другу поверхностями стеклянных 90-градусных призм. Ширина зазора регулируется наложением слоёв клейкой ленты. (рис. 2) Сперва оговоримся, что в данной работе падающая световая волна обладает s-поляризацией. Для данного вида интерферометра был решён ряд задач:

Определены оптическая разность хода:

$$\Delta \approx 2n'h \cos \theta', \quad (1)$$

и соответствующая разность фаз в точке Р (рис. 3):

$$\delta \approx \frac{4\pi}{\lambda_0} n'h \cos \theta' = \frac{4\pi h}{\lambda_0} \sqrt{n'^2 - n^2 \sin^2 \theta} \quad (2)$$

где λ_0 - длина волны лазерного излучения, n' и n - коэффициенты преломления;

Рассмотрена задача о балансировке интенсивности двух лучей, образующихся в клине (рис.

4):

$$I_1 = I_0 T_1 R_2 T_1 = I_0 T_1^2 R_2$$

$$I_2 = I_0 T_1 T_2 R_2 T_2 T_1 = I_0 T_1^2 T_2^2 R_2 \quad (3)$$

где R и T – соответствующие коэффициенты отражения и преломления света от границы раздела сред:

$$R_1 = \frac{\sin^2(\alpha - \beta)}{\sin^2(\alpha + \beta)}$$

$$R_2 = \frac{\sin^2(\theta - \gamma)}{\sin^2(\theta + \gamma)}$$

$$T_1 = 1 - R_1 = \frac{\sin 2\alpha \sin 2\beta}{\sin^2(\alpha + \beta)}$$

$$T_2 = 1 - R_2 = \frac{\sin 2\theta \sin 2\gamma}{\sin^2(\theta + \gamma)} \quad (4)$$

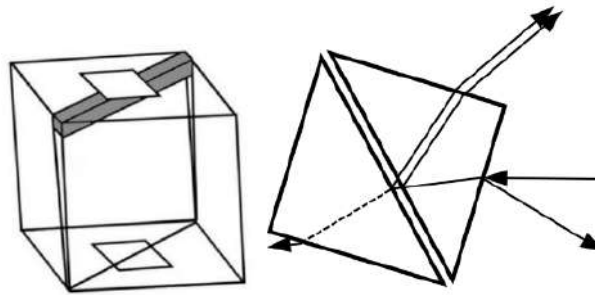


Рис. 2. Схема интерферометра

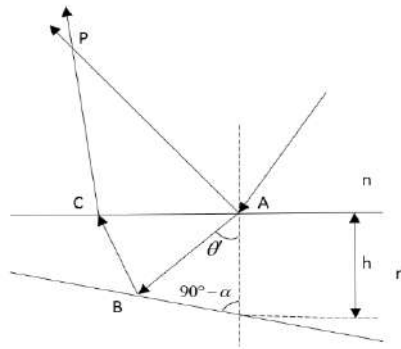


Рис. 3. Схематичное представление геометрической задачи

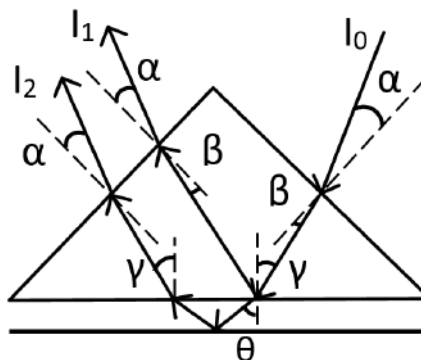


Рис. 4. Схематичное представление задачи по определению интенсивностей

Данный вид интерферометра обладает такими преимуществами как: простота и компактность устройства интерферометра; устойчивость установки; удобная регулировка ширины интерференционных полос под необходимые условия измерений в отдельный момент времени относительно пробоя (рис. 1).

Литература

1. *Медведев М.А., Паркевич Е.В., Хитко М.А. и др.* Нитевидная микроструктура токовых каналов в искровой стадии наносекундного разряда // Сб. тр. конф. "Импульсная сильноточная вакуумная и полупроводниковая электроника". М.: ФГБУН Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 2017.
2. A simple air wedge shearing interferometer for studying exploding wires S. A. Pikuz,^a) V. M. Romanova,^a) N. V. Baryshnikov,^b) Min Hu, B. R. Kusse, D. B. Sinars,^c) T. A. Shelkovenko,^a) and D. A. Hammer Laboratory of Plasma Studies, Cornell University, Ithaca, New York 14853.
3. *Max Born & Emil Wolf* Principles of Optics (Pergamon Press 1970)

УДК 537.53

Исследование параметрического рентгеновского излучения в порошковых мишенях

И.А. Кишин^{1,2}, А.С. Кубанкин^{1,2}, Р.М. Нажмудинов^{1,2}, Е.В. Болотов¹

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

²Белгородский государственный национальный исследовательский университет

Как известно расстояние между кристаллографическими плоскостями сопоставимо с длиной волны рентгеновского излучения. По этой причине кристаллы выступают в качестве дифракционных решеток для рентгеновских лучей [1]. Это взаимодействие можно назвать дифракцией реальных фотонов. С другой стороны, параметрическое рентгеновское излучение (ПРИ) было описано как дифракция кулоновского поля заряженной частицы, движущейся в кристалле. Этот механизм называется дифракцией псевдо, виртуальных или эквивалентных фотонов [2].

В данной экспериментальной работе представлены исследования излучений, возникающих при взаимодействии электронов с энергией 7 МэВ и рентгеновских лучей с мишенью, изготовленной из вольфрамового порошка с размером 0.8 - 1.4 мкм. Измерения соответствуют дифракции виртуальных и реальных фотонов соответственно. Порошок вольфрама был выбран потому, что в области энергий от 2 кэВ до 7 кэВ дифракционные пики от пяти кристаллографических плоскостей (110), (200), (211), (220), (310) можно анализировать без влияния фоновых пиков. Кроме того, было показано [3], что все спектральные пики проявляются одновременно согласно кинематической теории ПРИ в поликристаллах [4].

Характеристики обоих дифракционных процессов анализируются и сравниваются. Обсуждаются такие параметры, как выход дифракционного пика, ширина на полувысоте дифракционного пика и отношение дифракционного пика к фону.

Дополнительно в работе представлены поисковые исследования ПРИ релятивистских электронов из порошковых мишеней с ультрадисперсным размером зерен.

Работа выполнена при финансовой поддержке конкурсной части госзадания по созданию и развитию лабораторий, проект № FZWG-2020-0032 (2019-1569) и при поддержке стипендии Президента Российской Федерации для молодых ученых и аспирантов № СП-765.2019.2

Литература

1. *R.W. James.* The Optical Principles of the Diffraction of X-rays. (1948).
2. *X. Artru, P. Rullhusen.* Parametric X-rays and diffracted transition radiation in perfect and mosaic crystals// Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 145 (1998) 1-7.
3. *V.I. Alekseev, A.N. Eliseyev, E. Irribarra, I.A. Kishin, A.S. Klyuev, A.S. Kubankin, et al.,* Parametric X-ray radiation from powders // Physics Letters A. 383 (2019) 770-773.
4. *V. Astapenko, N. Nasonov, P. Zhukova.* Anomalous peak in the spectrum of polarizational bremsstrahlung from relativistic electrons moving through a solid target // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 40 (2007) 1337-1346.

Капиллярный волновод рентгеновского излучения

А.Р. Кириллова, С.Н. Жабин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В ряде научных работ показан волноводный эффект для рентгеновского излучения при его распространении в планарных структурах [1-2]. В работах [3-5] приведены теоретические модели для описания этого явления. В данной работе сделана попытка создать волновод рентгеновского излучения и провести наблюдения волноводного эффекта.

Для практического получения капилляров был использован метод сжатия исходных стеклянных трубок-заготовок, - по аналогии с тем как ведётся вытяжка оптического волокна [6]. В данной работе были получены стеклянные микрокапилляры из исходных коммерчески доступных стеклянных трубочек с внутренним диаметром 100 мкм и внешним диаметров 400 мкм. Экспериментально показано, что с помощью метода разогрева стекла до температуры размягчения исходная стеклянная трубка начинает медленно сжиматься за счёт действия сил поверхностного натяжения. Путём подбора температурного режима данного процесса можно добиться сужения внутренней полости до размеров менее чем 10 мкм.

Для реализации данного процесса была собрана установка из цилиндрической печи и набора креплений для удержания исходной заготовки в области разогрева (рис.1). В качестве заготовок использовались коммерчески доступные стеклянные трубки с внешним диаметров 400 мкм и диаметров внутренней полости около 100 мкм. Температура в печи контролировалась с помощью термопары. Для частичного устранения эффекта неравномерности температурного поля использовался подвижный подвес держателя заготовки который перемещался вниз-вверх в течении всего процесса формирования микрокапилляра.

При нагреве до $\sim 700^{\circ}\text{C}$ и длительности процесса сжатия около 15 минут внутренняя полость сжимается до размера около 10 мкм. Дальнейшее сжатие возможно проводить при более низкой температуре, однако требуются дополнительные методы контроля размера полости.

Полученные капилляры использовались в эксперименте по наблюдению явления прохождения рентгеновского излучения через полость капилляра. Рентгеновское излучение подавалось на широкий торец капилляра и регистрировалось на выходе из него. Для регистрации использовался счётчик фотонов на основе полупроводникового детектора. Изучение профиля излучения выходящего с торца капилляра проводилось с помощью метода подвижной заслонки.

Продемонстрирован эффект прохождения излучения через полость капилляра, получен профиль распределения интенсивности рентгеновского излучения на выходе из капилляра.

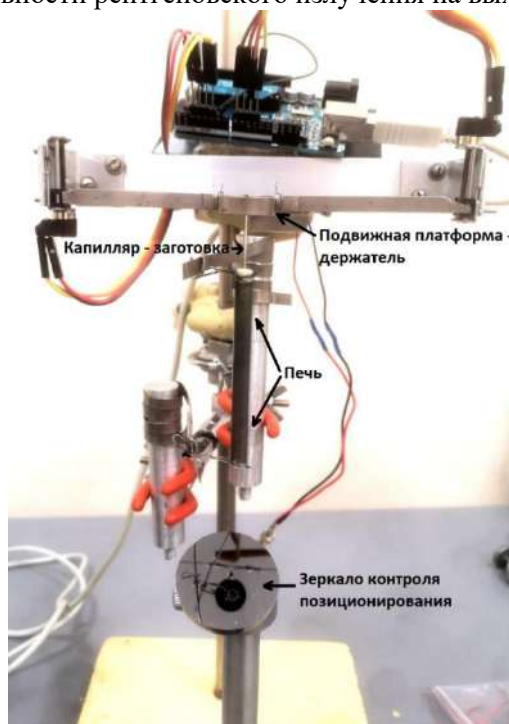


Рис.1. Установка для формирования микрокапилляров

Литература

1. Egorov V. K., Egorov E. V. Planar waveguide resonator: a new device for X-ray optics // X-Ray Spectrometry: An International Journal. 2004. Т. 33. №. 5. С. 360-371.
2. Egorov V. K., Egorov E. V. The experimental background and the model description for the waveguide-resonance propagation of X-ray radiation through a planar narrow extended slit // Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy. 2004. Т. 59. №. 8. С. 1049-1069.
3. Salditt T. et al. X-ray optics on a chip: guiding X-rays in curved channels // Physical review letters. 2015. Т. 115. №. 20. С. 203902.
4. Jarre A. et al. Two-dimensional hard x-ray beam compression by combined focusing and waveguide optics // Physical review letters. 2005. Т. 94. №. 7. С. 074801.
5. Spiller E., Segmüller A. Propagation of x rays in waveguides // Applied Physics Letters. 1974. Т. 24. №. 2. С. 60-61.
6. Бутусов М.М., Галкин С.Л., Оробинский С.П. Волоконная оптика и приборостроение. Л.: Машиностроение, 1987. — 328 с.

УДК 53.081.1

Метод калибровки массы в новом определении СИ при комнатной температуре

Д.В. Спинов, И.В. Колесников

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В 2019 году Международная система единиц СИ переопределила килограмм через фиксированные значения фундаментальных физических постоянных. Проблема состоит в том, что для определения килограмма используются низкотемпературные эксперименты, такие как квантовый эффект Холла, для определения сопротивления и эффект Джозефсона, для определения напряжения, что усложняет и удорожает сам процесс.

В данной работе мы предлагаем метод позволяющий калибровать массу при комнатной температуре, за счет замены низкотемпературных экспериментов на воспроизводимые при комнатной температуре- эффекта Джозефсона на Опыт Франка-Герца и квантового эффекта Холла на квантование проводимости. Также нами были проделаны все эксперименты и оценена их точность.

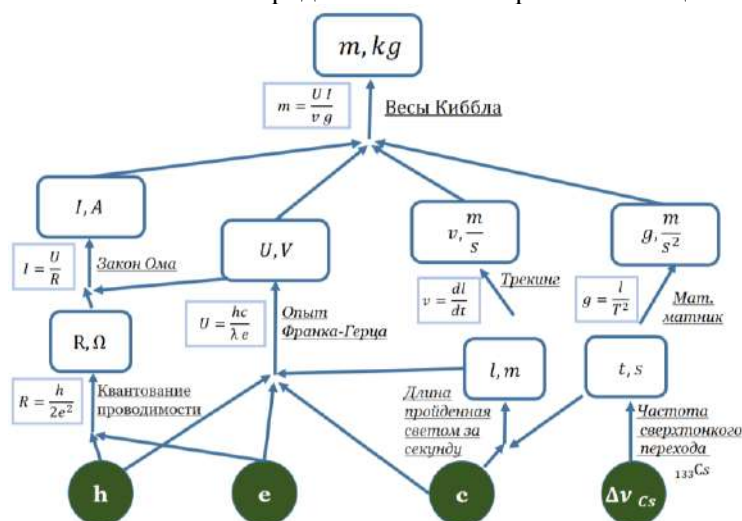


Рис. 6. Схема демонстрирующая взаимосвязь фундаментальных постоянных и массы через эксперименты

Определить напряжения можно за счет Опыт Франка-Герца:

$$eU = \Delta E = \frac{hc}{\lambda}$$

где e — заряд электрона, h — постоянная планка, c — скорость света, U — Напряжение между двумя максимумами, λ — длина волны возбуждения атома гелия. Экстремумы возникают за счет приобретения электронами достаточной энергии для возбуждения атома гелия.

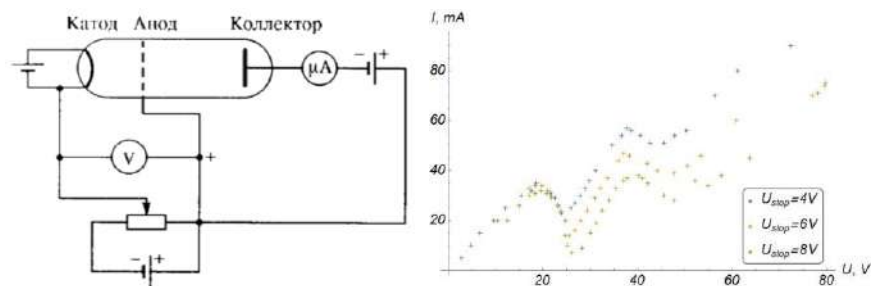


Рис. 2. (а) Схема установки. (б) График зависимости тока коллектора от напряжения на Аноде.

Для определения сопротивления можно использовать квантования проводимости возникающий при размыкании золотых контактов. Значение проводимости кратно:

$$G = \frac{2e^2}{h}$$

где e – заряд электрона, h – постоянная планка, G – Проводимость

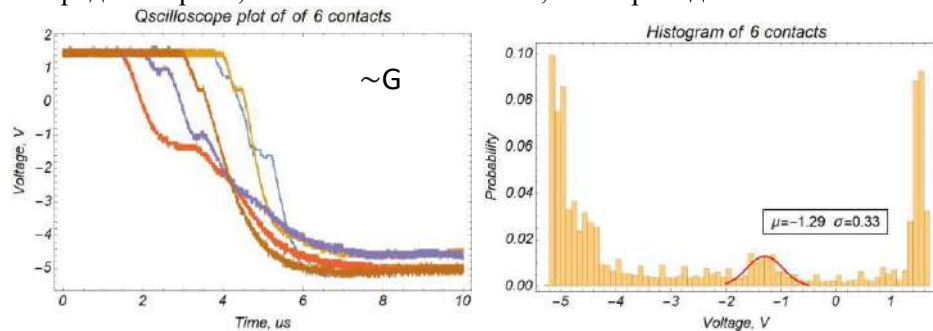


Рис. 3. (а) Осциллограмма при размыкании контактов. (б) Гистограмма 6 размыкании
Масса определяется с помощью Весов Киббла показанных на (Рис. 4).

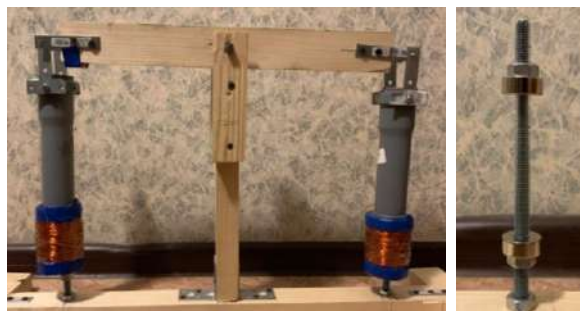


Рис. 4. (а) Весы Киббла – установка для определения массы.

(б) Магниты создающие радиальное поле

Данная установка работает за счет балансирования неуравновешенной массы силой ампера возникающей за счет протекания тока по катушке. Значение BL можно заменить за счет эффекта самоиндукции при движении катушки в радиальном магнитном поле. Тогда масса равна:

$$mg = BLI$$

$$V = BLv$$

$$m = \frac{VI}{gv}$$

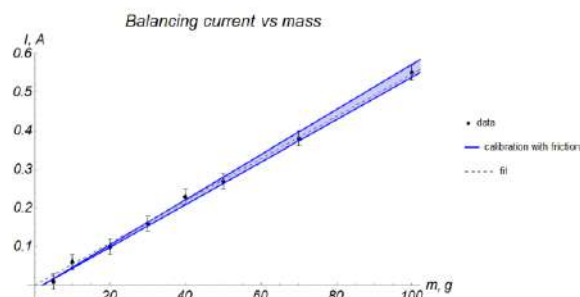


Рис. 5. Зависимость тока уравнивания от взвешиваемой массы, где синяя линия значение калибровки

Мы хотели бы поблагодарить Л.А. Мельниковского за полезные замечания, а также К.Сладкова, А.Сухова, И.Полоника, Е.Зворыгину, Г.А. Карнуп, А.М. Черкасов, М.А. Бочков.

Литература

1. Игошин Ф. Ф., Самарский Ю. А., Ципенюк Ю. М.; Под ред. Ципенюка Ю. М. Учебное пособие для вузов — М.: Физматкнига, 2012. ISBN 978-5-89155-206-7.
2. J.L. Costa-Krimer, N. Garcia, P. Garcia-Mochales, P.A. Serena, “Nanowire formation in macroscopic metallic contacts: quantum mechanical conductance tapping a table top” -- Surf. Science Lett. 342, p.1144, 1995
3. M. Stock, “Watt balance experiments for the determination of the Planck constant and the redefinition of the kilogram,” Metrologia 50, R1–R16 (2013).

УДК 53.06

Метод навигации, основанный на анализе степени поляризации небесного свода

Г.А. Карнуп, А.М. Черкасов, М.А. Бочков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рассеиваясь в атмосфере, солнечный свет поляризуется. Причем в зависимости от таких параметров, как широта, положение солнца, дата и время суток поляризованная область будет располагаться в различных участках неба. Таким образом, из наблюдений за движением поляризованного участка можно определять с некоторой точностью вышеописанные параметры и использовать их для навигации. При этом присутствие облаков способствует потере поляризации излучения, что ухудшает точность метода.

В данной работе мы демонстрируем устройство насадки на фотокамеру и алгоритм обработки изображений, позволяющие наблюдать степень поляризации излучения, попавшего в объектив. Пользуясь этими данными определяется положение солнца, широта с которой велась съемка, дата и время даже в облачную погоду. Также мы предлагаем метод оценки влияния облачности на отклонения предсказания алгоритма.

Устройство представляет из себя механизм, устанавливаемый перед объективом фотокамеры (Рис.1). В работе используется камера с широкоугольным объективом и поляризационный фильтр.



Рис. 7. Устройство в рабочем состоянии

При вращении поляризатора на матрицу камеры попадают последовательные изображения неба. Обработав снимки, соответствующие всем направлениям поляризатора, можно восстановить двумерное изображение степени поляризации изображения, попавшего в камеру.

Алгоритм, предсказывающий положение солнца, работает по принципу сравнения полученной фотографии с теоретически рассчитанным изображением. Для каждой позиции солнца в качестве теоретического изображения используется сгенерированное изображение с рассчитанной в каждой точке степенью поляризации (Рис. 2). Расчет производится согласно уравнениям Рэлея [1]:

$$\gamma = \arccos(\cos \theta \cos \theta_s + \sin \theta \sin \theta_s \cos(\varphi - \varphi_s))$$

$$P = \frac{P_{max} \sin^2 \gamma}{1 + \cos \gamma^2}$$

где γ – угол поляризации, (φ, θ) – меридиональный и азимутальный углы наблюдателя, (φ_s, θ_s) – меридиональный и азимутальный углы солнца, P – степень поляризации, P_{max} – максимальная степень поляризации (~ 0.8). Далее вводится функция ошибки, определяемая, как сумма корней квадратов разности значений интенсивности в каждой точке фотографии и теоретического изображения.

После запуска алгоритм фиксирует несколько различных начальных точек, координаты солнца в которых есть пара (φ_s, θ_s) разбросанных по всей фотографии. В окрестности заданной точки алгоритм ищет точку с минимальной ошибкой и задает найденную точку, как новую начальную. Координаты солнца в точке с глобальным минимумом функции ошибки алгоритм выдаёт как предсказанные. Для улучшения сходимости к экспериментальной фотографии применяется маска и гистограммная эквализация.

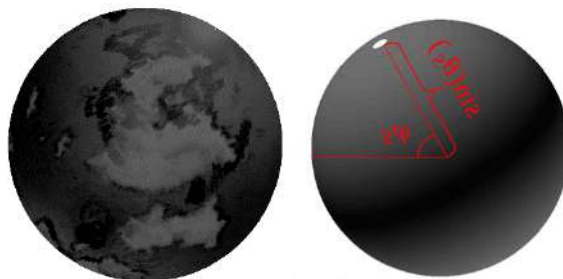


Рис. 2. Пример сгенерированного изображения для $(\varphi_s, \theta_s) = (60^\circ, 70^\circ)$

Делая съемку неба в течение дня была эмпирически получена траектория солнца, которая позже была наложена на реальную траекторию, на широте эксперимента: 56.48 (Рис. 3).

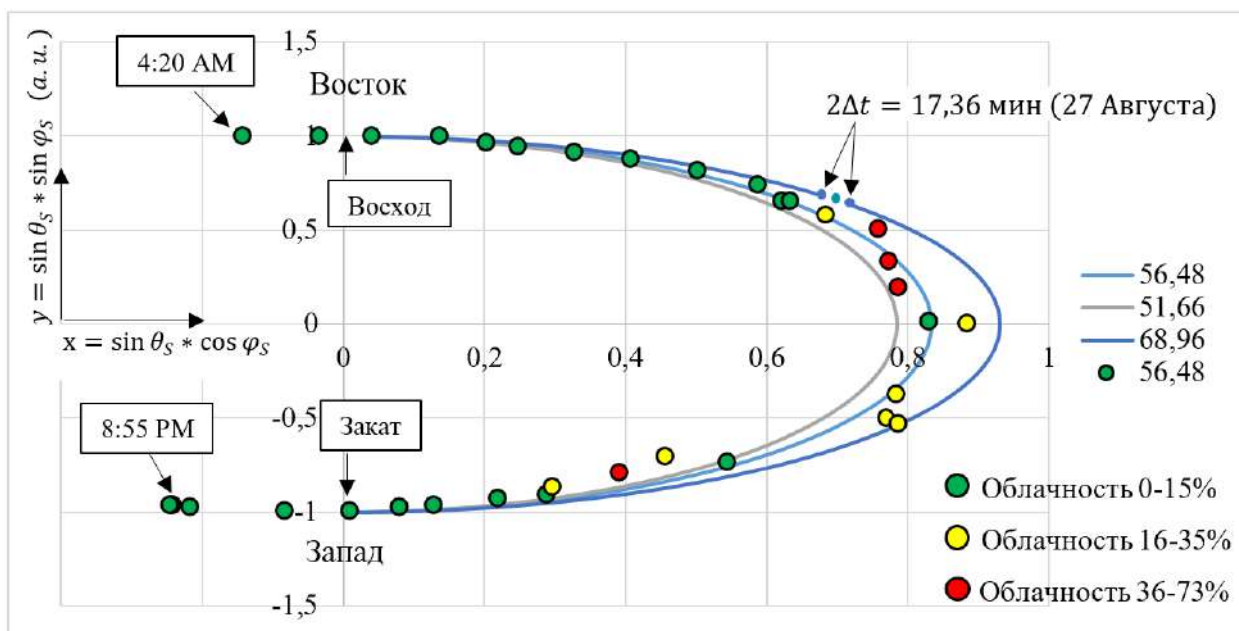


Рис. 3. Сравнение экспериментальной (точки) и реальной (линии) траекторий солнца для различных широт.

Учитывая второй закон Кеплера, можно по двум фотографиям неба, сделанным в разное время, определить стороны света. Траектория, максимально совпадающая с экспериментальными точками может указать с некоторой точностью широту и время съёмки. Широту можно определить следующим образом: 1) рассчитать сумму расстояний от экспериментальных точек до траекторий солнца на различных широтах. 2) широту траектории, для которой сумма расстояний наименьшая, считать искомой. Точность метода увеличивается при увеличении количества снимков, сделанных в разное, и падает при увеличении облачности.

Для оценки влияния облаков были вычислены ошибки метода и представлены на графике. Степень облачности коррелирует с ошибкой. Например, для ошибки в 5 градусов теоретический максимум покрытия неба оптически плотными облаками, не вносящий ошибку в измерение, составляет 70%. В случае оптически разреженных облаков, степень покрытия неба может достигать 100%.

Мы хотели бы поблагодарить С.В.Виноградова и А.А.Нозика за помощь и полезные замечания, а также К.Сладкова, А.Сухова, И.Полоника, Е.Зворыгину, Д.Спинова, И.Колесникова.

Литература

1. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т. 4. Оптика. Физматлит, 2002. ISBN 5-9221-0230-3
2. Gábor Horváth [et al.]. How the clear-sky angle of polarization pattern continues underneath clouds: full-sky measurements and implications for animal orientation. The Journal of Experimental Biology 204, 2933–2942 (2001)
3. Hao Lu [et al.] Angle algorithm based on Hough transform for imaging polarization navigation sensor. Optics express, Vol. 23, pp. 7248-7262 (2015)

УДК 536.242

Методы определения коэффициента теплоотдачи в системе твердое тело - газ

Д.А. Беляева

Донской государственный технический университет

Теплоотдача - это процесс теплообмена между твёрдой стенкой и окружающей средой, под которой подразумевается:

- при конвективной теплоотдаче: любая текучая среда (жидкость или газ);
- при лучистой теплоотдаче: система твердых тел или излучающая и поглощающая газовая среда.

Рассмотрим в качестве теплоносителя двухфазную систему газ - твердые частицы. В этой системе определим теплоотдачу и от чего зависит коэффициент теплоотдачи.

Отметим тот факт, что в зависимости от температуры рассматриваемого твердого тела и окружающей среды тепловой поток может поступать на само тело при условии, что температура окружающей среды больше температуры твердого тела или уходить с поверхности тела, если температура окружающей среды меньше температуры поверхности твердого тела.

В инженерной практике принято исследовать теплоотдачу, а конвективный теплообмен внутри рассматриваемого теплоносителя при этом не рассматривать.

Тепловой поток при процессе теплоотдачи всегда направлен от более нагретой среды к среде с меньшей температурой. В данном процессе теплоотдачи плотность теплового потока, согласно закону Ньютона, прямо пропорциональна температурному напору между теплоносителем и поверхностью теплообмена.

В нашей задаче расчета теплоотдачи необходимо определить тепловой поток, которым обменивается рассматриваемая стенка и окружающая среда. Для этого закон Ньютона запишем в виде:

$$Q = \alpha |T_f - T_w| F \quad (1)$$

где Q – тепловой поток, Вт; α – коэффициент теплоотдачи, Вт/(м²·К); T_f и T_w – температуры окружающей среды и поверхности тела (поверхности раздела фаз), °С или К; F – площадь поверхности теплообмена, м².

При имеющихся заданных данных, таких как геометрический размер системы теплообмена, а так же температурах текущей среды и поверхности твердого тела задача данного расчета теплового потока сводиться к нахождению коэффициента теплоотдачи α .

Коэффициент конвективной теплоотдачи α_k получают экспериментально, по правилам и следуя требованиям теории подобия. При этом данные результаты проводимого эксперимента представляют в виде критериальных уравнений подобия. Которые мы рассмотрим дальше.

Если выражать численно коэффициент теплоотдачи будет равен тепловому потоку, который приходится на единицу площади поверхности при температурном напоре, который равен единице, то есть

$$\alpha = \frac{Q}{F |T_f - T_w|} \quad (2)$$

Прежде всего, на величину коэффициента пропорциональности имеет влияние, фазовое состояние и теплофизические свойства теплоносителя, режим течения теплоносителя, а также вид его движения (естественное или вынужденное).

Для качественной оценки зависимости коэффициента теплоотдачи от режима течения теплоносителя, рассмотрим уравнение теплоотдачи в дифференциальной форме. Рассматривая нахождение теплового потока по закону Фурье и согласно закону Ньютона, если приравнять правые части уравнений получаем, что:

$$\alpha = - \frac{\lambda}{|T_f - T_w|} \left(\frac{\delta T}{\delta n} \right)_n \quad (3)$$

где n – нормаль к поверхности тела.

Данное уравнение выражает условие теплоотдачи на границе "твердая стенка-теплоноситель".

Из него следует несколько выводов. Для начала чем больше скорость движения теплоносителя, тем меньше будет толщина самого пограничного слоя и тем самым становиться больше градиент температуры, из чего следует, что коэффициент теплоотдачи больше. Что показывает влияние размера и формы теплообмена на коэффициент теплоотдачи через толщину пограничного слоя.

На коэффициент теплоотдачи влияют температуры поверхности теплообмена и теплоносителя через воздействие на физические свойства теплоносителя.

Так же величина коэффициента теплоотдачи зависит от физических свойств теплоносителя. Таким образом с увеличением плотности, теплопроводности, а также теплоемкости и уменьшением вязкости коэффициент теплоотдачи будет возрастать.

Что приводит к выводу от том, что в самом общем виде данный коэффициент теплоотдачи является функцией многих факторов:

$$\alpha = f(X, \Phi, l, c, \nu, \rho, \lambda, c_p, T_m, T_{cm}, \dots) \quad (4)$$

где X – характер движения теплоносителя; Φ – форма поверхности теплообмена; l – характерный геометрический размер; c – скорость движения теплоносителя; ν – вязкость; ρ – плотность; λ – теплопроводность; c_p – **теплоемкость**.

В зависимости от поставленной задачи для определения коэффициента теплоотдачи можно использовать следующие методы: аналитический, экспериментальный, а также метод теплового подобия.

Что бы определить коэффициент теплоотдачи в настоящее время в основном используют метод теплового подобия, в котором объединены положительные стороны экспериментальных и аналитических методов.

Литература

1. Бухмиров В.В. Тепломассообмен: Учеб. Пособие.//Иваново, 2014. 360с.
2. Бухмиров В.В. Теоретические основы теплотехники. Основы тепломассообмена // Иваново, 2011. 68 с.

УДК 538.931

Определение практического коэффициента Вант-Гоффа разбавленных растворов в осмотической системе с субнаноразмерными порами

И.А. Горемыкин, Е.А. Курелюк, Г.И. Лапушкин, Н.А. Наумов, Н.В. Плевако, В.Ю. Стожков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Для однокомпонентных сильноразбавленных растворов зависимость изобарно-изотермического от числа частиц N растворителя и n растворенного вещества выражается [1] следующей формулой $G(P, T) = N\mu_0(P, T) + nk_B T \ln \frac{n}{eN} + n\psi(P, T)$ (1), где $\mu_0(P, T)$ – химический потенциал растворителя, а $\psi(P, T)$ – слабоизменяющаяся функция, зависящая только от давления и температуры. Тогда химические потенциалы растворителя $\mu_0(P, T)$ и растворенного вещества $\mu(P, T)$ можно получить, дифференцируя (1) по N и n соответственно:

$$\mu_0(P + \Delta P, T) = \mu_0(P, T) - k_B T \frac{n}{N}; \quad \mu(P + \Delta P, T) = k_B T \ln \frac{n}{N} + \psi(P, T) \quad (2)$$

Допуская, что v – объем, занимаемый молекулой растворителя в жидкости - в разбавленных растворах практически не зависит от концентрации, осмотическое давление будет равно

$$\Delta P_{\text{осм}} = \frac{n k_B T}{N v} \quad (3)$$

Движущей силой осмотических процессов является разность химических потенциалов растворителя в осмотике и чистом растворителе, тогда при постоянной температуре $\Delta \mu_0 = \int_{P_1}^{P_2} d\mu(P) = \int_{P_1}^{P_2} v dP = v \Delta P_{\text{осм}}$. В случае, если молекулярный объем растворителя, находящегося в порах мембраны v_1 равен молекулярному объему растворителя в осмотике v , то из формулы (3) в предположении, что $n \ll N$ легко получить закон Вант-Гоффа - $\Delta P_{\text{осм}} = C_n RT$, где C_n – молярная концентрация всех частиц, образованных при растворении осмотика. В модели молекулярно-ситового транспорта растворителя через мембрану с размерами пор, сравнимыми с размерами диффундирующих молекул, упаковка последних будет не самая плотная, и молекулярный объем должен заметно отличаться от такового в объеме жидкости в большую сторону. Тогда выражение для величины осмотического давления примет следующий вид: $\Delta P_{\text{осм}} = C_n RT \frac{v}{v_1}$ (4). Таким образом, практический коэффициент Вант-Гоффа Φ , являющийся эмпирической поправкой к закону Вант-Гоффа, равен v/v_1 . В настоящей работе экспериментальная проведена проверка высказанной выше гипотезы с использованием растворов желтой кровяной соли $K_4[Fe(CN)_6]$ с титрами 0.125, 0.25, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0 г/л и сахарозы $C_{12}H_{22}O_{11}$ с титрами 6.0 и 8.0 г/л.

Автоматизированная установка для измерения давления в осмотической ячейке описана в работе [2]. В качестве разделяющих элементов использовались промышленные полиамидные тонкопленочные композитные мембраны TW-30-1812-50HR производства компании FilmTec (США), имеющие характерный размер пор порядка 0,2 нм. Для создания избыточного гидростатического давления в ячейке до 1 ати, в блок заполнения ячейки был включен узел нагнетания раствора, собранный на перистальтическом насосе HA1B06TY (Shenzhen, KHP) с коллекторным двигателем постоянного тока. Установка скорости подачи осмотика в ячейку осуществлена путем плавного изменения напряжения питания насоса при помощи регулятора напряжения на MOSFET – транзисторе.

Измерения временной зависимости давления в ячейке при прямом и обратном осмосе на растворах желтой кровяной соли и сахарозы показали для неизменных концентраций сходимость установившихся значений в пределах 140 Па (рис.1).

Результаты измерений установившегося давления в осмотической ячейке при различных температурах, их линейная регрессия и теоретическая зависимость осмотического давления от концентрации показаны на рисунке 2. Для учета различных значений температуры в сериях экспериментов и различного числа частиц v , образуемых при растворении твердых исходных веществ построен график зависимости $\frac{\Delta P_{\text{уст}}}{RT}$ от $C_n = C_m \cdot v$, где C_m – молярная концентрация раствора. Коэффициент наклона такого графика и будет равен практическому коэффициенту Вант-Гоффа.

$\Delta P_{\text{уст}}$ для растворов сахарозы лежат несколько ниже регрессионной прямой, что может быть связано с наличием сорбированной воды в исходном реактиве. Кроме того, при титре раствора 0,125 г/л наблюдается аналогичный эффект, т.к. осмотический поток даже в начальные моменты времени сравним по величине с потоком утечки из ячейки, что приводит к заниженному значению установившегося давления. Нужно заметить, что для линейной регрессии коэффициент детерминации R^2 практически равен 1, что свидетельствует о высокой значимости, использованной для описания процессов переноса воды через мембрану с сверхмалыми порами модели ситового транспорта. Эта модель предполагающая, что через мембрану могут диффундировать только молекулы, диаметр которых меньше размеров пор в мембране, хорошо описывает процессы обратного осмоса для наноразмерных мембран. Напротив, попытка объяснить уменьшение осмотического давления по сравнению с расчетным с точки зрения распространенной капиллярно-фильтрационной модели (КФМ) [3], предполагающей образование слоя связанной воды на поверхности мембраны и внутри пор, вызывает трудности. Это связано с тем, что в КФМ поры считаются достаточно большими, чтобы вместить в себя кластеры молекул воды, объединенные водородными связями. Молекулы, входящие в состав кластеров образуют также водородные связи с функциональными группами полимера мембраны. Таким образом, молекулярный объем H_2O внутри пор не должен значительно измениться по сравнению с объемом в жидкой фазе.

В мембранах с субнаноразмерными порами само понятие «пора» вполне условно – вакансия между полимерными цепями и выполняет роль «прохода» для диффундирующих частиц. Предположение, подтвержденное вышеуказанными экспериментами, дает возможность предположить,

что, варьируя типы и концентрации вакансий полимерных тонкослойных мембранах, можно изменять режимы и характеристики осмотических разделителей жидких смесей, в частности, уменьшить энергоёмкость процессов очистки воды.

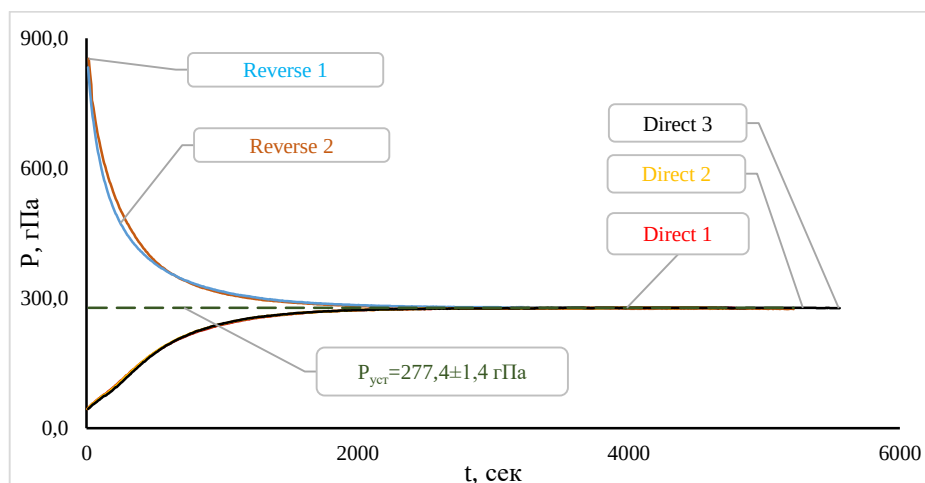


Рис. 1. Временная зависимость давления в осмотической ячейке в прямом и обратном процессах, осмотик - сахараза, 6 г/л, $t=40^{\circ}\text{C}$.

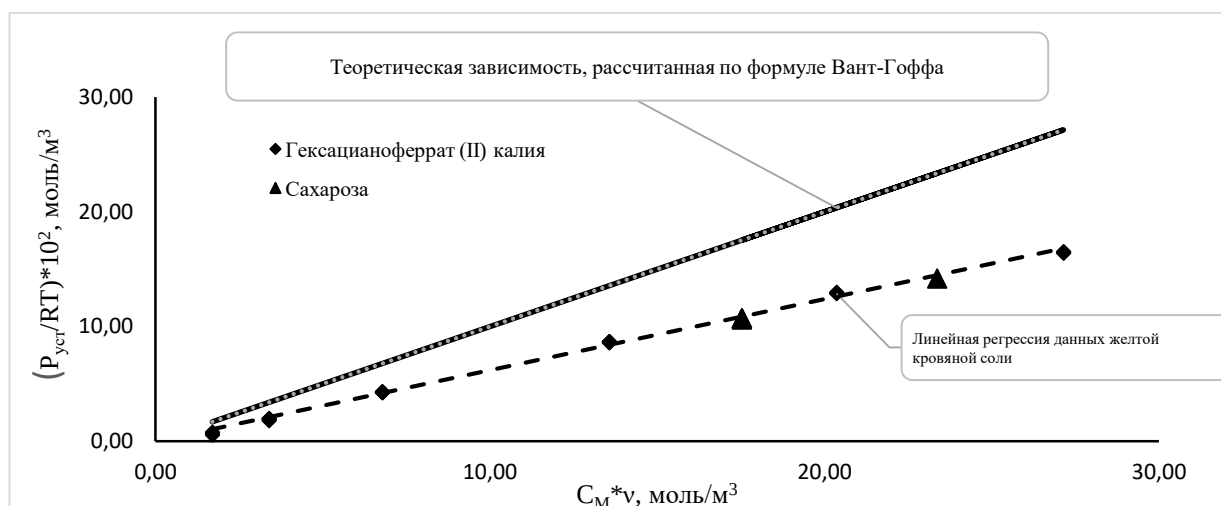


Рис.2. Зависимость $\frac{\Delta P_{уст}}{RT}$ от концентрации частиц в осмотике, v – число частиц, образуемое молекулой растворяемого вещества при растворении.

Литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика Ч.1. М.: Физматлит, 2002. 616 с.
2. Болейко Г.М. [и др.] Определение практического коэффициента Вант-Гоффа в осмотической ячейке, содержащей раствор гексацианоферрата (II) калия// Труды 62-й Всероссийской научной конференции МФТИ (18–24 ноября 2019). Фундаментальная и прикладная физика. М.: МФТИ. 2019. С. 31-33.
3. Sourirajan S. Mechanism of Demineralization of Aqueous Sodium Chloride Solutions by Flow, under Pressure, through Porous Membranes// Ind. Eng. Chem. Fundamen. 1963, V2(1) P.51–55, doi.org/10.1021/i160005a010.

УДК 535.3

Определение условий для исследования продольного сдвига перетяжки пучка Гаусса

И.Ю. Лукьяненко¹, Н.Д. Кундикова^{1,2}, Э.А. Бибикова^{1,2}

¹Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)

²Институт электрофизики УрО РАН

При определенных экспериментальных условиях в сфокусированных пучках возможны продольный и поперечный сдвиг перетяжки. Поперечный сдвиг перетяжки наблюдается в асимметричном сфокусированном пучке Гаусса при смене знака циркулярной поляризации [1]. Теоретически было показано, что продольный сдвиг перетяжки может наблюдаться при диафрагмировании пучка Гаусса [2]. Цель данной работы – определить экспериментальные условия, при которых можно обнаружить продольный сдвиг перетяжки пучка Гаусса.

Рассматривалось распространение света через линзу, после которой вплотную располагалась диафрагма с изменяемым радиусом от 0,10 мм до 0,68 мм. Распространение пучка описывалось волновым уравнением, которое решалось спектральным методом. Положение перетяжки определялось как точка на оси распространения, в которой значение интегральной интенсивности, нормированной на максимум, минимально.

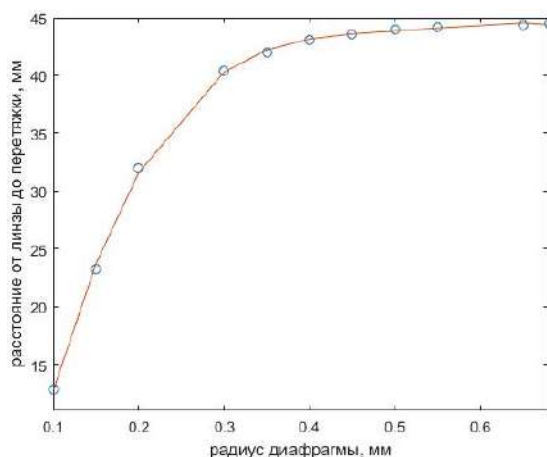


Рис. 1. Зависимость положения перетяжки сфокусированного пучка Гаусса от радиуса диафрагмы, фокусное расстояние линзы $f=44,5$ мм.

На рис. 1 представлен график зависимости положения перетяжки пучка Гаусса от величины радиуса диафрагмы с фокусным расстоянием линзы 44,5 мм. Из графика видно, что расстояние от линзы до перетяжки изменяется сильнее при малых радиусах диафрагмы от 0,1 мм до 0,35 мм. При изменении значения радиуса диафрагмы от 0,4 мм до 0,5 мм, происходит сдвиг положения перетяжки от 43,0 мм до 43,9 мм. В данном случае сдвиг не превышает расстояние в 1 мм, однако, существует экспериментальный метод, который позволяет определить это положение с большой точностью до 0,01 мм [3].

Литература

1. Kundikova, N. D., Podgornov, F. V., Rogacheva, L. F., Zel'Dovich, B. Y. Manifestation of spin-orbit interaction of a photon in a vacuum // Pure Appl. Opt. 1995. V. 4(3), P. 179.
2. De Nicola, S., Anderson, D., Lisak, M. Focal shift effects in diffracted focused beams // Pure Appl. Opt. 1998. V. 7, P. 1249.
3. Bibikova, E. A., Al-wassiti, N., Kundikova, N. D. Diffraction of a Gaussian beam near the beam waist // Journal of the European Optical Society. 2019. V.15(1), P. 1.

УДК 519.242.5

Оптимизация стратегии эксперимента

В.С. Пальмин

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

Современные исследования становятся все более дорогими, но данные, получаемые на эксперименте ничем заменить нельзя. Поэтому требуется планировать эксперимент таким образом, чтобы извлекать максимальную информацию при минимальном количестве измерений. В этой работе рассмотрена проблема оптимизации стратегии измерений в задачах с многими параметрами. В

частности, рассмотрена задача оптимизации стратегии измерения на примере бета-распада трития [1] при добавлении линейного слагаемого, которое является первым приближением различных явлений. В случае сильной корреляции параметров эксперимента θ , в рассматриваемом примере параметра четыре – максимальная энергия, шум, калибровка и линейная добавка, увеличение информации об определенной части спектра при сохранении общего объема информации может привести к уменьшению ошибки целевого параметра.

Одним подходом является решение задачи минимизации функции ошибки целевого параметра путем вариации стратегии, которая разлагается по базису. Стратегией измерения будет распределение времени от энергии $T(E)$, для простоты и наглядности это будет отрезок фиксированной ширины, то есть одномерная задача. Для каждой стратегии будем статистически моделировать спектр, фитировать его и получить погрешность параметра. Получим зависимость ошибки определения параметра максимальной энергии (рис. 1), варьируя положение отрезка $T(E)$. Видно, что есть оптимум, который немного отстает от конца. Таким же образом можно оптимизировать и более сложные формы зависимости $T(E)$, но стабильности время такого анализа ограничено процедурой фитирования спектра.

Эту же задачу можно решить и полу-аналитически с использованием информации Фишера [2]. Приведем соответствующую математическую постановку, опустив выкладки. Распределение каждой измеренной точки спектра будем считать нормальным с пуассоновской ошибкой:

$$P_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi\mu_k T_k}} e^{-\frac{(y_k - \mu_k T_k)^2}{2\mu_k T_k}}, \quad (1)$$

где μ_k и T_k – скорость счета и время измерения k -й точки спектра соответственно, а y_k – ожидаемое число событий. Тогда матрица информации Фишера $I(\theta)$ будет равна:

$$[I(\theta)]_{ij} = E \left[\left(\frac{\partial}{\partial \theta_i} \log L(\theta|X) \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta_j} \log L(\theta|X) \right) \right] = \sum_k T_k \frac{\partial \mu_k}{\partial \theta_i} \frac{\partial \mu_k}{\partial \theta_j} \frac{1}{\mu_k}, \quad (2)$$

здесь $L(\theta|X) = \prod_k P_k$ – функция правдоподобия. Оценку погрешности измерений можно получить из неравенства Крамера-Рао для несмещенной оценки [3]

$$\Sigma(\hat{\theta}) \geq I^{-1}(\theta), \quad (3)$$

где Σ – матрица ковариаций, n – объем выборки. Интересующая нас погрешность – это диагональный элемент матрицы Σ . Варьируя стратегию T_k можно оптимизировать этот параметр. Аналитически это сделать не удастся, так как обращение матрицы – не линейная операция, но эту задачу можно решить численными методами. По предварительным оценкам, «оптимальная» стратегия (рис. 2) даст выигрыш в ошибке целевого параметра, который в данном случае является максимальной энергией, в 1.5 раза в сравнении с начальной стратегией.

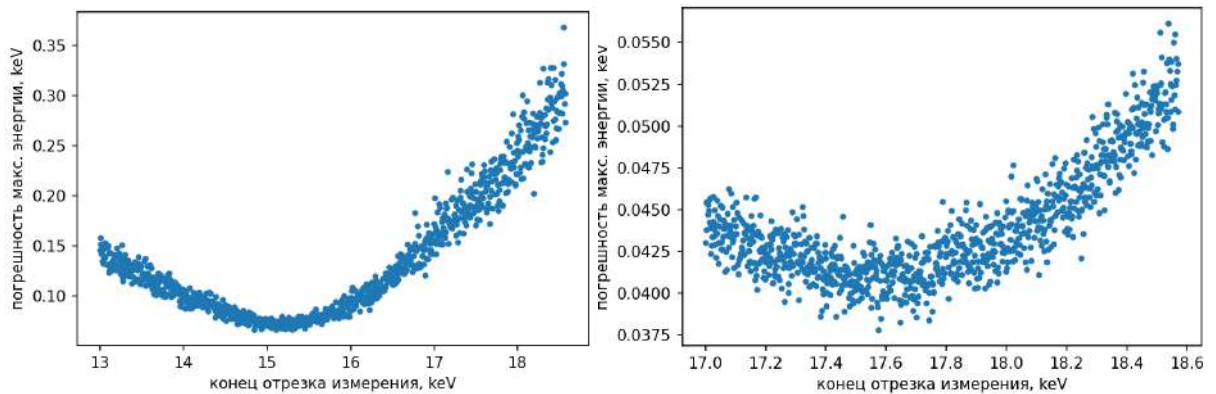


Рис. 1. Зависимость ошибки определения параметра максимальной энергии от положения отрезка измерения при ширине отрезка 13 keV (слева) и 17 keV (справа)

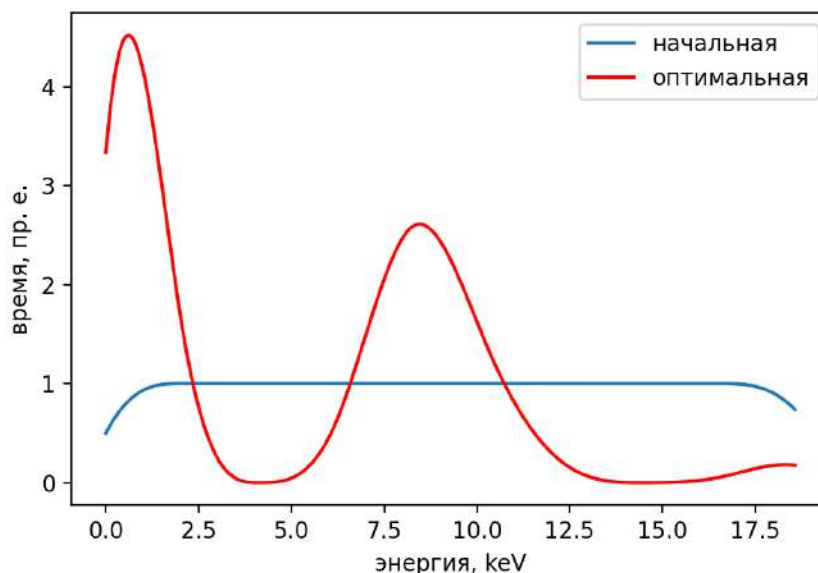


Рис. 2. Оптимальная и начальная стратегии измерения спектра

Литература

1. Abdurashitov D.N. et al. The current status of “Troitsk nu-mass” experiment in search for sterile neutrino // JINST 2015, 10 T10005
2. Shahmohammadi A., McAuley K.B. Sequential Model-Based A-Optimal Design of Experiments When the Fisher Information Matrix Is Noninvertible // Ind. Eng. Chem. Res. 2019, 58, 1244–1261
3. Ллойд Э., Ледерман У. (ред.). Справочник по прикладной статистике. Том 1. М.: Финансы и статистика, 1989. 510 с.

УДК 53.023

Оценка количества убегающих электронов в атмосфере Земли

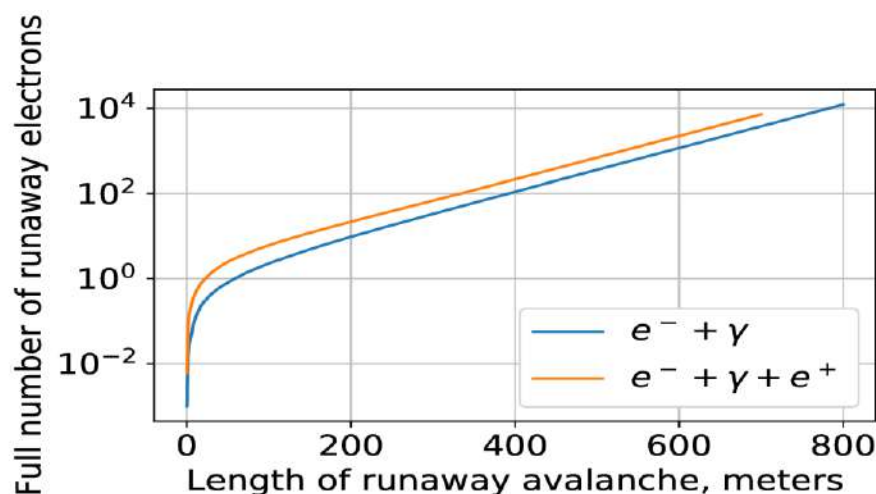
М.Е. Зелёный^{1,2}, А.А. Нозик^{1,2}, Е.К. Свечникова³, Е.М. Стадничук^{1,2}, Т.М. Хамитов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт ядерных исследований РАН

³Институт прикладной физики РАН

Связь между грозами и релятивистскими лавинами убегающих электронов (RREA) - важная тема, привлекающая внимание многих исследователей. Помимо прочего, существует множество различных моделей динамики электронных лавин. В недавней статье [1] представлены результаты 3D-моделирования развития сходной лавины методом Монте-Карло. Статья посвящена переходу от лавины к стримеру и рассмотрению критической лавины, то есть лавины, в которых собственное поле становится сопоставимым с внешним полем. Это условие аналогично критерию лавинно-стримерного перехода для таунсендской электронной лавины [2]. Собственное поле определяется не только числом электронов, но и поперечным размером лавины, поэтому переход в критическую стадию определяется также за счет поперечной диффузии убегающих электронов [3]. Но в нашем расчете собственное поле лавины не учитывается, так как в нашем моделировании лавина не достигает критической стадии. Одним из основных результатов [1] является оценка количества электронов в одной лавине: 10^{17} - 10^{18} . Это значение значительно превышает значения, представленные в наших расчетах, которые показаны на Рис. 1. Разница может быть связана с некоторыми нестандартными приближениями, сделанными в статье [1]. Результаты моделирования в GEANT4 показывают сомнительность выводов, сделанных в [1], где количество электронов в RREA сильно завышено. Чтобы проиллюстрировать физическую причину ограничения числа частиц, мы даем простую аналитическую оценку верхней границы.



Литература

1. Oreshkin E., The critical avalanche of runaway electrons // Europhysics Letters ,2018
2. Meek, J. M., A Theory of Spark Discharge // Phys. Rev., 1940, p.722-728
3. Dwyer, J.R., Diffusion of relativistic runaway electrons and implications for lightning initiation // Journal of Geophysical Research: Space Physics, 2010

УДК 537.5

Оценка эффективности потока ионов как рабочего тела для авиационного двигателя

М.А. Павлова, М.В. Хорохорин, И.Д. Григорьевых, А.Г. Лапушкин, В.Ю. Стожков, Г.И. Лапушкин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время большое распространение получили электроракетные двигатели разных конструкций. Они имеют различные принципы создания потоков ионов, но общее то, что они имеют чрезвычайно высокую эффективность (высокий удельный импульс), недостижимый никаким другим способом. Также активно конструируются самолеты с электроприводом, в связи с созданием эффективных аккумуляторов.

В связи с этим представляет большой интерес внедрение электропривода в малые беспилотные самолеты. В настоящее время на них часто устанавливают легкие электродвигатели, но также представляет большой интерес установить ионный двигатель, поскольку он может быть существенно легче, что очень важно для легких малых беспилотных самолетов с возможностью многодневного полета и питанием от солнечных батарей [1]. Для этого необходимо экспериментально проверить эффективность подобных двигателей.

Типичный атмосферный ионный двигатель создается с помощью электродов различной конфигурации, на электроды подается высокое напряжение (5-50 КВ), один из электродов служит для ионизации атмосферных газов, после чего полученные ионы ускоряются в электрическом поле, созданном электродами. При этом изначально появившиеся ионы должны быть нейтрализованы на другом электроде (чтобы конструкция в целом оставалась электронейтральной), но они за время движения успевают передать свой импульс нейтральным молекулам газа. Второй электрод делается большей площади и с закругленными краями (чтобы не вызывать ионизацию).

В данной работе была изучена тяга двигателей двух различных конструкций, основанных на ионном потоке и сделаны измерения параметров. Первая конструкция (график а) представляет собой квадрат с лентой из фольги и медной проволокой на расстоянии 1 см. Во второй конструкции медная проволока заменена на 25 игл.

Полученные результаты приведены на графиках. Из первого графика видно, что эффект начинает быть заметным при 7КВ (при 10.4КВ происходит пробой и эффект исчезает). Напряжение пробоя зависит от конструктивных особенностей двигателя. У второй конструкции эффект появляется при 6КВ и пробой происходит при 11КВ.

Измеренная величина удельной тяги высокая и превышает удельную тягу авиационного двигателя. Например, современная самолетная турбина SaM146 потребляет 0,63 кг/кГс*час, что составляет примерно 130 мГс/Вт в расчете на полное энерговыделение сжигаемого топлива. Видно, что параметры простой лабораторной модели заметно превышают эти параметры, это дает основания надеяться, что поток ионов может обеспечить существенно более высокие параметры двигателя в авиации, нежели используемые сегодня турбины.

Сравнение двигателя, основанного на ионизации с помощью иголок показывает, что для такого двигателя удельная тяга получается еще более высокой и превосходит параметры авиационного двигателя в 4-5 раз. Разумеется при повышении общей мощности параметры удельной тяги могут снижаться. Но при этом, согласно литературным данным, можно ожидать значительного повышения (в 2-3 раза) потока ионов от такого двигателя с увеличением высоты полета до 10 км [2].

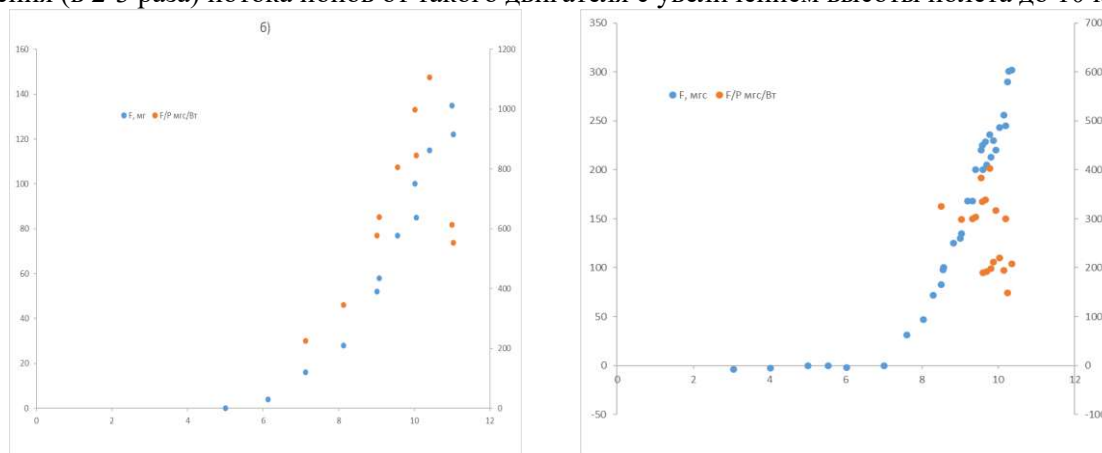


Рис.1. Зависимость тяги в миллиграмм-силах (синие точки) и удельной тяги в миллиграмм-силах на Вт (оранжевые точки) в зависимости от подведенного напряжения в КВ для нити диаметром 0.05мм на расстоянии 1 см от большого электрода (а); аналогичные зависимости для ионного ветра на основе 25 иголок.

Литература

1. Ma Chen A, [etc.]. Surface aerodynamic model of the lifter // Journal of Electrostatics 2013 V.71 P.134
2. P.O. Bedolla, G. Vorlaufer, P. Sequard-Base, A. Vernes, F. Franek. Altitude dependence of electrohydrodynamic flow in an electrostatic lifter // Journal of Electrostatics 2017 V.87 P.32

УДК 621.319.2

Применение метода ИК-спектроскопии для исследования влияния воды на свойства водосодержащих систем на основе чистого полиэтилена и полиэтилена с различными наполнителями

Ф.И. Логвин

Санкт-Петербургский государственный университет ветеринарной медицины

Исследование систем (включающих в свой состав воду) различного происхождения и разной комплексности для определения их структуры, состояния воды и её влияние на молекулярные процессы, является одной из важнейших проблем физики и молекулярной биофизики. Сегодня интерпретация многих процессов в биологических системах, в том числе и в биополимерных, невозможна без глубокого описания роли воды в этих процессах. Нельзя не признать, что понимание механизмов этих процессов в целом остаётся задачей, далёкой от своего окончательного решения из-за разноречивых, а зачастую и взаимоисключающих, интерпретаций. До сегодняшнего дня, не решён окончательно немаловажный вопрос о самой структуре воды. Некоторые особенности структуры и свойств, например, при различных условиях, или при взаимодействии с не содержащими воду компонентами живых систем - все это исследовано не до конца. При глубоком исследовании роли воды в механизмах биологических процессов необходимо тщательное планирование проводимых исследований.

Поэтому в данной работе сделана попытка исследовать влияние воды на электрофизические свойства наиболее хорошо изученных полимерных материалов, в структуре которых присутствуют молекулы воды, характеризующиеся большим количеством видов межмолекулярных взаимодействий.

С учетом того, что в составе полимера всегда присутствует вода, основное внимание уделено исследованию влияния воды на свойства водосодержащих систем на основе чистого полиэтилена и полиэтилена с различными наполнителями. В качестве наполнителей использовались крахмал и диоксид кремния (аэросил) в различной объемной концентрации.

Образцы были изготовлены в Казанском национальном исследовательском технологическом университете по ГОСТ 16337-77. Полиэтилен высокого давления марка 15313-003, ГОСТ 7699-78. Картофельный крахмал, ГОСТ 14922-77. Аэросил марка А-175.

Основной экспериментальной методикой была выбрана инфракрасная Фурье спектроскопия с учетом значимости её информативности. Главным достоинством этого метода является богатство информации, содержащееся в инфракрасном спектре, избирательность и достаточная быстрота анализа, а также возможность исследовать малые количества вещества. ИК-спектр можно назвать «отпечатком пальцев» молекулы, который легко отличим от спектров других молекул, так как не существует двух соединений с различными структурами, но одинаковыми ИК-спектрами.

Сопоставление экспериментально полученных ИК-спектров поглощения исходных и композитных пленок ПЭВД с включениями аэросила показывает, что в композитных пленках количество воды (перекиси водорода) существенно меньше, чем в исходных пленках.

На рисунке 1 наблюдается в чистом ПЭВД дублет валентных колебаний концевых групп ОН (3372 и 3434 см^{-1}), который с введением аэросила перекрывается полосой валентных колебаний силанольных групп. Известно, что сорбционная способность аэросила связана с наличием силанольных групп на поверхности частиц аэросила.

Отметим, что частоты всех полос, имеющих отношение к воде, адсорбированной в композитных пленках (1640 , 3372 , 3435 , 3605 , 3644 см^{-1}) совпали с таковыми в чистой пленке, и заметно отличаются от частот групп, содержащих ОН, традиционно приводимых в источниках, содержащих обзоры по ИК-спектрам кремнезема. Это объясняется тем, что в композитных пленках центры сорбции являются заряженным.

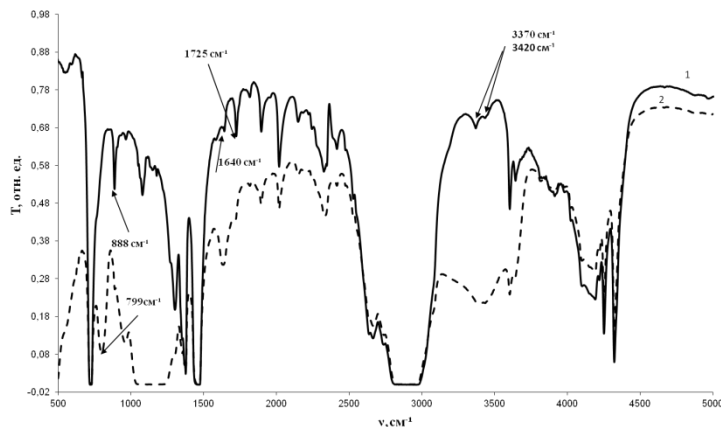


Рис.1. ИК-спектр пропускания ПЭВД чистого -1
и с наполнителем аэросил 4% - 2

Сравнение инфракрасных спектров в различных композитах указывает на чувствительность состояния молекул воды к влиянию окружения. Так, благодаря адсорбции воды (перекиси водорода), в пленке ПЭ на наноразмерных включениях диоксида кремния, объемная проводимость пленок ПЭ уменьшается, за счет чего увеличивается стабильность электретоного состояния.

В случае когда в качестве наполнителя использовался крахмал появляется полоса в области 929 см^{-1} , принадлежащая крахмалу и полоса в области 853 - 861 см^{-1} - полоса относится к свободным колебаниям молекул воды H_2O , а также полоса 3380 - 3440 см^{-1} которая принадлежит колебаниям гидроксильных групп в циклических формах крахмала и молекул воды, связанных водородными связями с этими циклами.

Исходя из полученных экспериментальных данных, можно сделать вывод, что внесение крахмала приводит к появлению дополнительных молекул воды, которые взаимодействуя с макромолекулами полиэтилена, приводят к увеличению проводимости композитного полимера.

Выводы

- 1) Сравнение инфракрасных спектров в различных композитах указывает на чувствительность состояния молекул воды к влиянию окружения.
- 2) Сопоставление полученных в ходе исследования ИК-спектров поглощения исходных пленок ПЭВД и ПЭВД с частицами аэросила показало, что в многокомпонентных пленках количество воды значительно меньше, чем в исходных. Так же подтверждается тот факт, что внесение крахмала приводит к появлению дополнительных молекул воды, которые при взаимодействии с макромолекулами полиэтилена увеличивают проводимость композитного полимера ПЭВД с крахмалом.
- 3) Полученный опыт позволяет сделать вывод о высокой эффективности использования методов оптической спектроскопии для исследования физических и физико-химических свойств водосодержащих биологических объектов.

Литература

1. Parida S.K, Dash S., Pate I S. and Mishra B.K. Adsorption of organic molecules on silica surface. / S.K Parida // *Advances in Colloid and Interface Science*. - 2006.- Vol. 121. - P. 77.
2. Гороховатский Ю.А., Бурда В.В., Карулина Е.А и др. Улучшение качества активной упаковки на основе полиэтилена высокого давления с бинарным наполнителем. / Ю.А. Гороховатский и др. // *Научное мнение: научный журнал*. 2013. – №10.
3. Гороховатский И.Ю. Исследование стабильности электростатического состояния в композитных пленках на основе полиэтилена высокого давления с наноразмерными включениями двуокиси кремния. / дисс. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук, СПб, 2009. – 137 с.

УДК 53.01

Простейшая реакторная модель динамики лавин убегающих электронов в грозовых облаках

Е.М. Стадничук

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики

Атмосферная физика высоких энергий всё больше и больше привлекает внимание той части научного сообщества, что занимается атмосферным электричеством. Считается, что лавины убегающих электронов, ускоряемые электрическим полем в грозовых облаках, могут играть существенную роль в грозовых явлениях [1]. Кроме того, надёжно установлено, что именно процесс ускорения релятивистских частиц во время грозы лежит в основе такого загадочного природного явления, как наземные гамма-вспышки (Terrestrial Gamma-ray Flashes, TGF) [2].

Одного лишь существования лавин убегающих электронов в грозовом облаке недостаточно для формирования TGF. Оказывается, чтобы создать мощный и в то же время короткий поток гамма-излучения, экспериментально наблюдаемого из космоса, необходим некоторый механизм дополнительной генерации лавин релятивистских электронов [2]. Возможный способ увеличить поток частиц в лавинах - наличие обратной связи в их динамике. Впервые модель с обратной связью предложил Джозеф Дваер [3]. Однако для наличия бесконечной обратной связи Дваера требуются слишком большие крупномасштабные атмосферные электрические поля [4].

Была предложена новая модель динамики лавин убегающих электронов с обратной связью, которая получила название реакторной модели [5]. Её суть заключается в том, что дополнительное усиление лавин релятивистских частиц в грозовых электрических полях возможно за счёт их неоднородности. Показано, что в неоднородном поле ячейки с квазиоднородным электрическим полем обмениваются между собой гамма-излучением, что приводит к общему росту потока частиц высокой энергии.

Рассмотрим случай простейшего реактора: когда две ячейки смотрят друг на друга. Эта модель интересна своей простотой, а также реализуемостью в рамках общепринятых моделей структуры электрического поля в грозовых облаках. В рассматриваемой системе подавляющий вклад в обратную связь будут вносить гамма-кванты. Предположим, что в верхней ячейке зародилась лавина убегающих электронов. Эта лавина по ходу своего развития будет излучать тормозные гамма-

кванты, которые способны проникнуть во вторую ячейку. Во второй же ячейке, по мере своего распространения гаммы будут рождать вторичные электроны, у которых есть вероятность развернуться и родить вторичные лавины. Эти лавины в свою очередь излучают новые гаммы, тем самым закливая процесс.

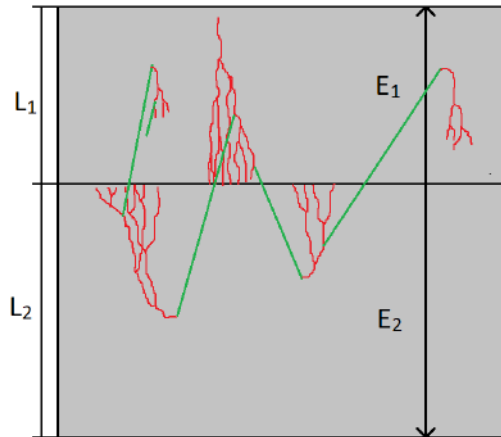


Рис. 1. Иллюстрация процессов, протекающих в простейшем реакторе. Красные треки - убегающие электроны, зелёные - гамма-кванты.

Пусть λ_{RREA}^i - длина нарастания лавины убегающих электронов, λ_{γ}^i - длина пробега убегающего электрона до излучения гамма-кванта с надкритической энергией, λ_e^i - длина пробега гаммы до рождения убегающего электрона, а P^i - вероятность разворота электрона с дальнейшим развитием лавины убегающих электронов. Эти параметры зависят от величины электрического поля и плотности воздуха. Для общности считается, что в разных ячейках разные поля, плотности и длины ячеек.

Пусть ν^i - количество гаммы, излученной i -ой ячейкой при попадании в неё 1 гамма-кванта из другой ячейки. Простой кинетический расчёт приводит к формуле:

$$\nu^i = P^i \frac{\lambda_{RREA}^i}{\lambda_{\gamma}^i (\lambda_{RREA}^i + \lambda_e^i)} \left[\frac{\lambda_{RREA}^i \lambda_e^i}{\lambda_e^i - \lambda_{RREA}^i} \left(e^{\frac{L^i \lambda_e^i - \lambda_{RREA}^i}{\lambda_{RREA}^i \lambda_e^i}} - 1 \right) - \frac{\lambda_e^i}{2} \left(e^{-2 \frac{L^i}{\lambda_e^i}} - 1 \right) \right]$$

Отсюда нетрудно догадаться, что общий коэффициент усиления потока релятивистских частиц в рассматриваемой системе будет следующим:

$$\varepsilon = \nu^1 \cdot \nu^2$$

Если $\varepsilon > 1$, то в реакторе возникнет TGF, и будет наблюдаться экспоненциальный рост частиц высокой энергии во времени по закону:

$$N(t) = N_0 \cdot e^{\frac{c}{L_1 + L_2} \varepsilon t}$$

Эти формулы показывают очень интересный результат. Оказывается, что даже в такой простой реакторной модели для возникновения TGF требуются более реалистичные электрические поля, чем в модели Дваера. Например, если грозовое облако находится на высоте 10 км, то в модели Дваера требуется однородное поле с напряжённостью 200 кВ на м с протяжённостью порядка 750 метров. В таком простом реакторе требуется две смотрящие друг на друга ячейки с однородным полем, каждое из которых обладает напряжённостью 200 кВ на м и длиной 350 метров. В рамках общепринятой слоистой структуры грозowych электрических полей сценарий с простейшим реактором более реализуем.

Литература

1. Gurevich A. V. Zybin K. P. Physics-Uspekhi442001119.
2. Dwyer J. R. Journal of Geophysical Research: Atmospheres1132008. <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2007JD009248>
3. Dwyer J. R. Geophysical Research Letters302003. <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2003GL017781>
4. Zelenyi, Mikhail, Stadnichuk, Egor Nozik, Alexander EPJ Web Conf.201201907003. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201920107003>
5. Zelenyi M., Nozik A. Stadnichuk E. AIP Conference Proceedings21632019060005. <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.5130111>

Расчет и экспериментальная модель магнитогидродинамического двигателя

Н.Д. Гембицкий

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Простейший магнитогидродинамический (МГД) двигатель представляет собой погруженные в проводящую жидкость пластины-электроды и магнит, создающий между ними магнитное поле. При подаче напряжения на электроды в жидкости течет ток и возникает сила Ампера, действующая на каждый объемный элемент тока. Если подобный двигатель, включая магнит, закреплен на судне, на это судно будет действовать сила тяги, равная по модулю суммарной силе Ампера.

Целью данной работы являлось теоретическое обоснование и численный расчет модели МГД двигателя, а также экспериментальная проверка результатов расчета.

В теоретической части работы доказано, что расчет двигателя можно провести путем решения уравнения Лапласа с граничными условиями типа Дирихле (величины потенциала электрического поля на электродах) и Неймана (нулевая нормальная составляющая плотности тока у непроводящих поверхностей) [1]. При этом учтена возможная погрешность расчета, связанная, в частности, с ЭДС индукции в движущемся проводнике.

$$\Delta\varphi = 0 \quad (1)$$

$$\mathbf{j} = -\lambda * \nabla\varphi \quad (2)$$

$$I = \int \mathbf{j} dS \quad (3)$$

$$d\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{3(d\mathbf{m} * \mathbf{r})\mathbf{r} - d\mathbf{m} * r^2}{r^5} \quad (4)$$

Численный расчет уравнения Лапласа (1) производился в программе Wolfram Mathematica [2]. Было получено поле цилиндрического магнита, использовавшегося в эксперименте, на основе формулы (4), расчет подтвержден показаниями тесламетра в различных плоскостях, параллельных магниту (рис.1). Решение уравнения Лапласа позволило визуализировать, например, распределение плотности силы тока в объеме двигателя (рис.2) и рассчитать теоретическую силу тяги как интеграл плотности силы Ампера (3). Также с помощью данного метода расчета объяснены некоторые явления в канале с МГД насосом, описанные в работе [3].

В экспериментальной части работы была создана модель судна с МГД двигателем (рис.3). Разработана и запатентована в качестве полезной модели [4] система дистанционного управления моделью судна на базе микроконтроллера Arduino MEGA. Система позволила минимизировать связанные с трением погрешности при измерении силы тяги, изменять напряжение на электродах и фиксировать показания силы тока в цепи. Была снята зависимость силы тяги двигателя в статическом положении от силы тока, которая совпала с расчетной в пределах погрешности (рис.4). В качестве проводящей жидкости использовался раствор пищевой соды.

Таким образом, подтверждена возможность использования описанной теории для расчета МГД двигателей.

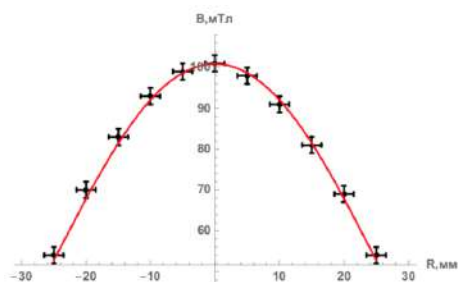


Рис. 1. Теоретическая (линия) и экспериментальная (точки) зависимость вертикальной составляющей индукции магнитного поля от координаты в плоскости, параллельной поверхности магнита

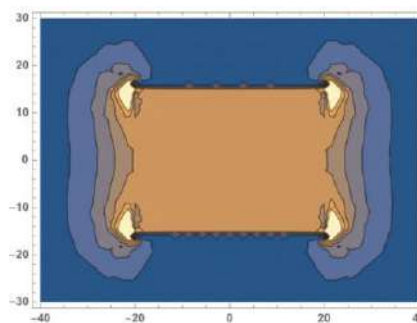


Рис. 2. Распределение модуля плотности силы тока между электродами в горизонтальном сечении двигателя

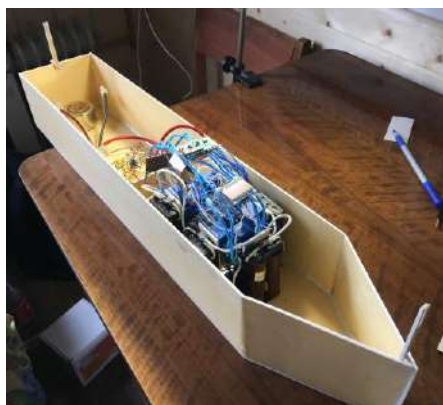


Рис. 3. Экспериментальная модель судна с МГД двигателем

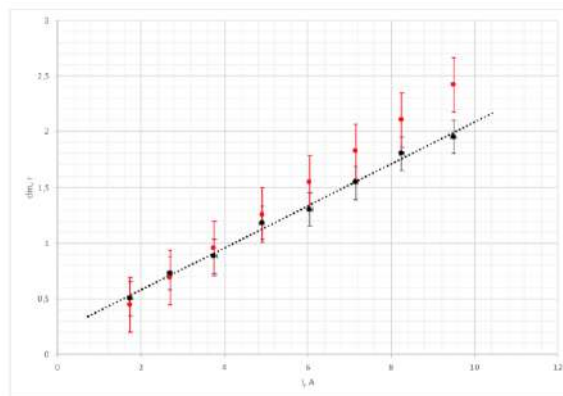


Рис. 4. График теоретической (красный) и экспериментальной (черный) зависимости силы тяги от силы тока в двигателе

Литература

1. Krasnov, Dmitry & Zikanov, Oleg & Boeck, Thomas. Numerical study of magnetohydrodynamic duct flow at high Reynolds and Hartmann numbers // Journal of Fluid Mechanics (2012), vol. 704, pp. 421-446.
2. www.wolfram.com/mathematica
3. Luciano Pires Aoki, Michael George Maunsell. Modeling and construction of a magnetohydrodynamic tunnel - Conference Paper // 21st Brazilian Congress of Mechanical Engineering, Natal, RN, Brazil, 2011.
4. Патент РФ на полезную модель № 197518, МПК G05B19/414, H02K44/08. Устройство управления моделью магнитогиродинамического двигателя [Текст]/ Гембицкий Н.Д. - № 2020104767; заявл.03.02.2020; опубл. 12.05.2020.- Бюл. №14.

УДК 53.06

Спектр нормальных частот линейных ионных кристаллов в комбинированных радиочастотно-оптических ловушках

Л.А. Акопян¹, И.В. Заливако², О.Ю. Лахманская¹, К.Е. Лахманский¹, К.Ю. Хабарова^{1,2},
Н.Н. Колачевский^{1,2}

¹Российский квантовый центр

²Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Рассмотрена динамика линейного кулоновского кристалла ионов $^{171}\text{Yb}^+$ в комбинированной радиочастотно-оптической ловушке, состоящей из квадрупольной ловушки Пауля и оптической решётки, направленной вдоль оси кристалла, изучены нормальные моды колебаний кристалла. Показано, что при соответствующем выборе частоты оптической решётки разброс мод уменьшается, что может быть использовано для более эффективного ЕИТ-охлаждения (electromagnetically induced transparency) ионов [1-3].

Моделирование поведения ионов в ловушке проводилось путем численного интегрирования уравнений движения методом молекулярной динамики (ММД) в присутствии сильного затухания. Далее вычислялись элементы матрицы вторых производных в положениях равновесия ионов [4]. Для реализации алгоритма был разработан модуль для комбинированного потенциала в пакете LIon [5]. Ниже приведена формула для потенциала комбинированной ловушки.

$$V = \sum_{i=1}^N \frac{m}{2} [\omega_r^2 x_i^2 + \omega_r^2 y_i^2 + \omega_z^2 z_i^2] + \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{d_{ij}} - \\ - \frac{4\pi\eta\alpha_e}{\pi w_0^2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{1 + z_i^2/z_R^2} \exp\left(-\frac{2r_i^2}{w_0^2(1 + z_i^2/z_R^2)}\right) \cos^2 k z_i,$$

где m, N – масса и полное число ионов, d_{ij} – расстояние между ионами i, j , ω_r и ω_z – радиальная и аксиальная секулярные частоты колебаний ионов в ловушке Пауля, e – элементарный заряд, η – волновое сопротивление вакуума, $\alpha_e = 100$ а.е. – поляризуемость иона, $\lambda_L = 532$ нм –

длина волны и $k = 2\pi/\lambda_L$ – волновой вектор лазера решетки, $w_0 = 50$ мкм – радиус перетяжки, $z_R = \pi w_0^2/\lambda_L$ – длина Рэлея, P – оптическая мощность в одном из двух пучков, образующих решетку, $r^2 = x^2 + y^2$ – расстояние от оси ловушки до иона.

Результаты моделирования для нормальных мод 8-ионного кристалла и значение оптимальной частоты оптической решетки, при которой диапазон мод минимален, приведены на рис. 1. Параметры ловушки: $\omega_z = 2\pi \times 100$ кГц и $\omega_r = 2\pi \times 650$ кГц.

На рис. 2 приведены результаты моделирования для нахождения оптимальных параметров решетки и соответствующих им разбросов частот мод в зависимости от параметра $\alpha = \omega_z^2/\omega_r^2$.

Рис. 3 содержит результаты исследования зависимости оптимизированных параметров решетки от длины ионного кристалла N . Из рис. 3 видно, что с увеличением числа ионов оптимальная частота решетки ν_0 уменьшается, однако, как и в случае с параметром α , минимальный диапазон частот мод $\Delta\omega$ растет и достигает $\Delta\omega = 2\pi \times 224$ кГц для кристалла из 8 ионов. Результаты моделирования позволяют сделать вывод, что при экспериментально достижимых оптических мощностях в решетке и параметрах ловушки возможно сужение диапазона частот, занимаемого нормальными модами, в несколько раз, что позволяет значительно увеличить эффективность охлаждения без выхода кристалла из линейной конфигурации и режима Лэмба-Дике. Таким образом, ЕИТ-охлаждение с использованием комбинированных радиочастотно-оптических ловушек является перспективным инструментом для работы с большими линейными ионными кристаллами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-12-00274.

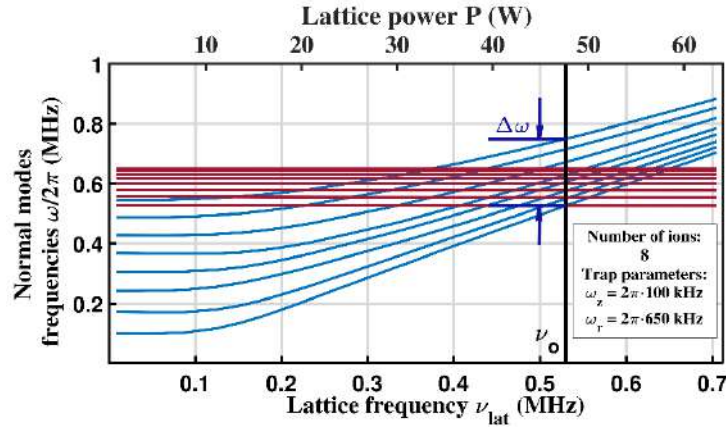


Рис. 1. Частоты аксиальных (синие кривые) и радиальных (красные кривые) нормальных мод колебаний 8-ионного линейного кристалла в зависимости от мощности приложенной оптической решётки. Вертикальная прямая показывает значение оптимальной частоты решётки $\nu_0 = 0.530$ МГц, при которой разброс мод по частотам минимален и равен $\Delta\omega = 2\pi \times 224$ кГц.

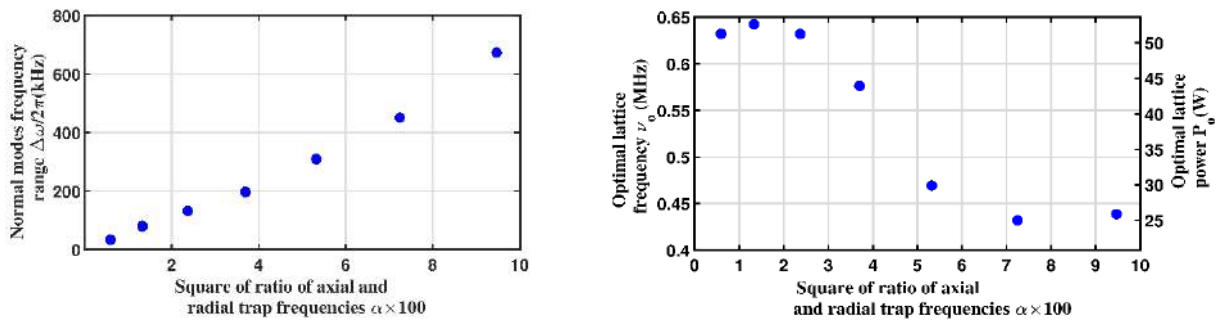


Рис. 2. Графики зависимости оптимальной частоты оптической решётки ν_0 (слева) и диапазона частот нормальных мод $\Delta\omega$ при оптимальной частоте решётки (справа) от параметра $\alpha = \omega_z^2/\omega_r^2$. Число ионов $N = 6$. Радиальная частота фиксирована $\omega_r = 2\pi \times 650$ кГц, аксиальная частота ω_z варьируется в пределах от $2\pi \times 50$ кГц до $2\pi \times 200$ кГц.

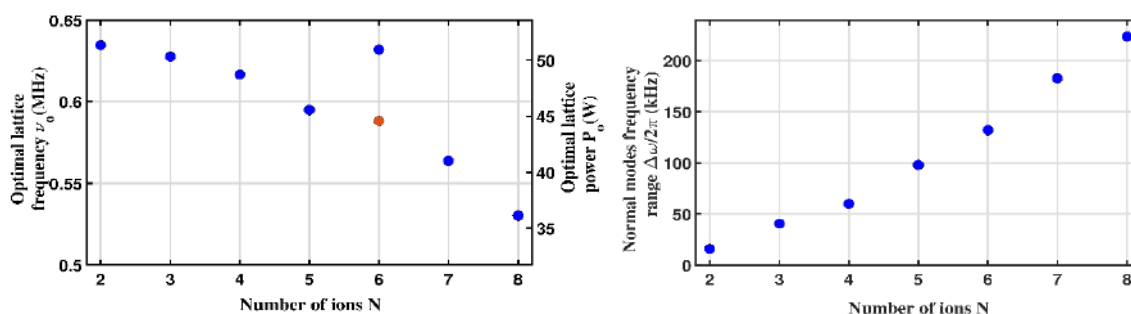


Рис. 3. Графики зависимости оптимальной частоты оптической решётки ν_0 (слева) и диапазона частот нормальных мод при оптимальной частоте $\Delta\omega$ (справа) от числа ионов N . Параметры ловушки: $\omega_z = 2\pi \times 100$ кГц и $\omega_r = 2\pi \times 650$ кГц. Аномальное значение частоты ν_0 при $N = 6$ связано с совпадением равновесных положений с пучностями решётки. Красной точкой показано значение частоты ν_0 при $\lambda_L = 500$ нм, при котором эффект более не наблюдается.

Литература

1. Акопян Л.А., Заливако И.В., Лахманский К.Е., Хабарова К.Ю., Колачевский Н.Н. // Письма в ЖЭТФ. 2020. Т. 112. В. 9.
2. Laupretre T., Linnet R.B., Leroux I.D., Landa H., Dantan A., Drewsen M., // Phys. Rev. A. 2019. V. 99. Iss. 3.
3. Semerikov I., Zalivako I., Borisenko A., Khabarova K., Kolachevsky N. // Journal of Russian Laser Research. 2018. V. 39. P. 568.
4. James D.F.V. // Appl. Phys. B. 1998. V. 66. P. 181.
5. Bentine E., Foot C.J., Trypogeorgos D. // Computer Physics Communications. 2020. V. 253, 107187.

УДК 543.429.23

Сравнение методов обработки данных диффузионного эксперимента DOSY для систем блок-сополимер - гомополимер

В.А. Шпоть¹, А.М. Перепухов¹, А.В. Максимычев¹, В.И. Гомзяк², С.Н. Чвалун²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²НИЦ «Курчатовский институт»

Биоразлагаемые блок-сополимеры представляют большой интерес в фармакологии в качестве носителей лекарственных средств. Их сложная структура, вариативность в строении и возможное наличие примесей (остаточных гомополимеров, блок-сополимеры других размеров, продукты разложения) требуют использования методов, способных детектировать различные взаимодействия внутри блок-сополимеров. Классическим методом изучения полимеров является спектроскопия ЯМР, включающая в себя одномерные и многомерные корреляционные эксперименты. Отдельно можно отметить диффузионный эксперимент DOSY, способный определить наличие примесей без разрушения образца. Несмотря на то, что DOSY обычно используют только в качестве иллюстрации, отдавая предпочтение таким методом, как ГПХ или масс-спектрометрия, при правильном подборе параметров эксперимента и методов обработки DOSY можно использовать как достойную альтернативу указанным методам для расчёта коэффициентов самодиффузии входящих компонентов и их массовых долей [1].

Применение диффузионных экспериментов для систем блок-сополимер – гомополимер, в которых сигналы компонентов в протонном спектре перекрываются, требует осторожного выбора методов обработки. Общая зависимость относительной интенсивности сигнала I/I_0 от величины, пропорциональной квадрату градиента Q , описывается многоэкспоненциальной функцией (1).

$$\frac{I}{I_0} = \sum_i X_{wt}^i \exp(-D_i Q), \quad (1)$$

где X_{wt}^i – массовая доля i -ого компонента, а D_i – его коэффициент самодиффузии.

Среди основных используемых методов можно выделить биэкспоненциальную аппроксимацию (2) и метод обратного преобразования Лапласа [2,3].

$$\frac{I}{I_0} = X_{wt}^1 \exp(-D_1 Q) + X_{wt}^2 \exp(-D_2 Q), \quad (2)$$

где X_{wt}^i – массовая доля i -ого компонента, а D_i – его коэффициент самодиффузии.

В данном исследовании были изучены характеристики методов обработки применительно к полимерным системам с целью определения наиболее эффективного подхода. Был проведён ряд экспериментов с блок-сополимерами разного размера, а также ряд модельных экспериментов с варьируемыми параметрами коэффициентов диффузии входящих компонентов, их массовой доли, шума и ширины распределения коэффициентов диффузии.

В результате исследования показано, что метод биэкспоненциальной аппроксимации с меньшей погрешностью описывает параметры изучаемой системы и является более стабильным. Однако этот метод не способен различить более двух компонент, в отличие от метода обратного преобразования Лапласа, неограниченного в их количестве. Так что предпочтительной остаётся комбинация из двух методов, в которой первоначально будет определяться предположительное количество компонентов в системе блок-сополимер – гомополимер, а затем, в зависимости от их количества, будет производиться расчет характеристик.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (соглашение с РФФИ 18-73-10079 от 01.08.2018 г).

Литература

1. Y. Bakkour, V. Darcos, S. Li, and J. Coudane, “Polymer Chemistry Diffusion ordered spectroscopy (DOSY) as a powerful tool for amphiphilic block copolymer characterization and for critical micelle concentration (CMC) determination,” *Polym. Chem.*, Т. 3, сс. 2006–2010, 2012.
2. W. Hiller, “Quantitative Studies of Block Copolymers and Their Containing Homopolymer Components by Diffusion Ordered Spectroscopy,” *Macromol. Chem. Phys.*, Т. 220, № 17, сс. 1–13, 2019.
3. Y. Xue *et al.*, “Effect of block sequence of hyperbranched block copolymers on the aggregation behavior, drug solubilization and release property,” *J. Mol. Liq.*, Т. 278, сс. 320–328, 2019.

УДК 532.5.032

Экспериментальные исследования физики квазидвумерной турбулентности

А.В. Орлов

Институт физики твёрдого тела РАН

Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН

Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики

Картины двумерной (2D) и трёхмерной (3D) турбулентности принципиально отличаются. В 3D ситуации устанавливается прямой Колмогоровский каскад энергии, когда в системе возникают всё более мелкомасштабные вихревые структуры в сравнении с масштабом, на котором турбулентность возбуждается [1,2]. В 2D случае существуют два неперекрывающихся инерционных интервала с прямым каскадом энтропии в сторону малых масштабов и обратным Крайчнановским каскадом энергии с возникновением всё более крупных вихревых течений [3,4]. В ограниченных системах обратный каскад может приводить к формированию когерентных структур – долгоживущих крупномасштабных образований на фоне мелкомасштабной турбулентности [4-8].

В настоящее время крупномасштабные когерентные структуры и переход от 2D турбулентности к 3D активно исследуют теоретически и в численных моделированиях [8,9].

В рамках данной работы впервые экспериментально исследована специфика формирования обратного энергетического каскада и крупномасштабных когерентных структур в квазидвумерном течении слоя жидкости при переходе от 2D режима к 3D: от системы, в которой формируется обратный каскад и когерентные структуры, к вихревой системе, в которой подобные структуры не возникают.

Экспериментальная методика. Для возбуждения квазидвумерных турбулентных течений в тонком слое жидкости используется магнитогидродинамическая методика (рис. 1) [4-7]. Слой электролита, водного раствора KNO_3 , налитого в ячейку из оргстекла, помещается в неоднородное периодическое магнитное поле, создаваемое решёткой из постоянных магнитов, расположенных в шахматном порядке по направлению поля на дне ячейки (неодимовые магниты с индукцией ~1 Тл около них). Сила Лоренца, возникающая при пропускании постоянного тока через электролит, вызывает движение жидкости.

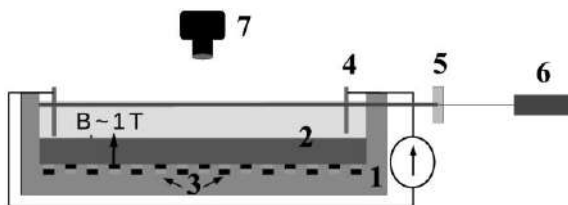


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: 1 - ячейка, 2 – жидкости, 3 - магниты, 4 - электроды, подключенные к источнику питания, 5 - цилиндрическая линза, 6 - лазер, 7 - камера.

Течение электролита регистрируется методом particle image velocimetry (PIV) [10]. Для этого в электролит добавляется порошок полиамида со средним диаметром частиц около 30 мкм, которые из-за равенства плотностей с KNO_3 полностью увлекаются движением жидкости. Чтобы детектировать движения полиамидных трейсеров только в тонком слое вблизи поверхности, поверхность жидкости подсвечивается лазерным листом толщиной около 1 мм, формирующимся после прохождения лазерного луча через линзу Пауэлла. Движения подсвеченных частиц регистрируются камерой Canon EOS6D с частотой 24 кадра в секунду. Обработка полученных кадров компьютерными алгоритмами позволяет рассчитать компоненты скорости движения v_x и v_y .

Энергетический спектр – распределение энергии по волновым числам $E(k_x, k_y)$, можно рассчитать по известным значениям v_x и v_y , как дискретное пространственное преобразование Фурье кинетической энергии двумерной системы. Распределение энергии по модулю волнового числа $E(k)$ можно вычислить усреднением $E(k_x, k_y)$ по кольцу.

Путём наливания жидкости из мерного стакана в ячейку была возможность регулировать глубину слоя электролита в пределах от 0.2 см до 1.4 см.

Экспериментальные результаты. Важнейшей характеристикой обратного каскада и возможности формирования крупномасштабных когерентных течений является поток энергии ε . Его значение может быть найдено экспериментально из энергетического баланса в квазистационарном режиме, когда энергия системы слабо флуктуирует. В эксперименте поток энергии близок к мощности диссипации энергии, тогда:

$$\varepsilon = \int_{k_{coh}}^{k_f} (2\nu k^2 + 2\alpha) E(k) dk$$

Значение коэффициента трения о дно α может быть получено из наблюдения заключительного этапа затухания крупномасштабного течения после выключения возбуждающей силы Лоренца. Используя экспериментальный спектр $E(k)$ и компьютерные алгоритмы можно определить поток энергии ε при разных глубинах жидкости (рис.2).

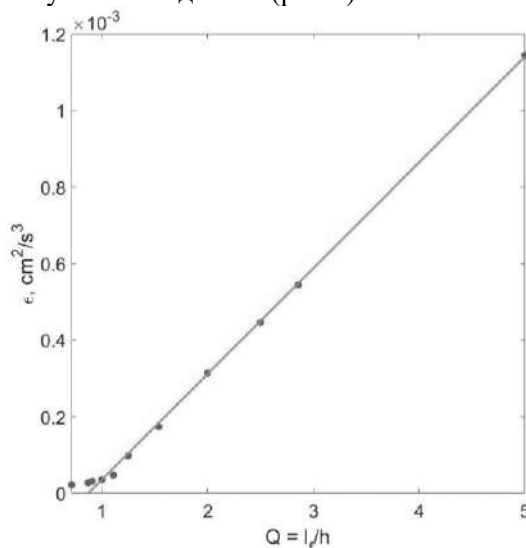


Рис.2. Поток энергии в обратном каскаде в зависимости от параметра двумерности $Q = l_f / h$. Глубины меняются от 0.2 см до 1.4 см. Масштаб накачки $l_f \approx 1$ см.

Как видно из графика, в области квазидвумерной турбулентности, когда толщина жидкости h больше масштаба накачки l_f (т.е. параметр двумерности $Q = l_f / h > 1$) поток энергии ε падает по гиперболическому закону в зависимости от увеличения толщины жидкости. В области близкой к Q

$= 1$, где $h = l_f$ и вихревые течения переходят к 3D режиму, поток энергии уменьшается слабее, выходя на близкое к постоянному малому значению.

Заключение. В работе были проведены лабораторные эксперименты по эволюции квазидвумерных вихревых течений в слоях жидкого электролита различной глубины (от 0.2 см до 1.4 см) в квадратной ячейке размерами 10x10x1.5 см электромагнитным методом при постоянной накачивающей силе Лоренца, с оптико-компьютерной регистрацией движения подсвеченных трекеров. Впервые экспериментально наблюден переход от квазидвумерной к трёхмерной развитой турбулентности в тонких слоях жидкости.

Литература

1. Колмогоров А.Н., ДАН СССР 30 (4), 299 (1941).
2. Филатов С.В., Орлов А.В., Бражников М.Ю., Левченко А.А., Письма в ЖЭТФ 108 (8), 549 (2018).
3. Kraichnan R.H., Phys. Fluids 10, 1417 (1967).
4. Орлов А.В., Бражников М.Ю., Левченко А.А., Письма в ЖЭТФ 107 (3), 166 (2018).
5. Орлов А.В., Труды 60-й Всероссийской научной конференции МФТИ: Фундаментальная и прикладная физика, 120-122 (2017).
6. Орлов А.В., Бражников М.Ю., Левченко А.А., Нелинейные волны 2018, 132 (2018).
7. Орлов А.В., Нелинейные волны 2016, 113 (2016).
8. Chertkov M., Connaughton C., Kolokolov I., and Lebedev V., PRL 99, 084501 (2007).
9. Biferale L., Buzzicotti M., and Linkmann M., Phys. Fluids 29, 111101 (2017).
10. Adrian R.J., Annual Review of Fluid Mechanics 23, 261 (1991).

Секция проблем безопасного развития атомной энергетики

Председатель: Л.А. Большов (д.ф.-м.н., акад. РАН)
Зам. председателя: А.С. Филиппов (д.т.н., профессор)
Секретарь: И.Г. Обухова

Дата: 26.11.2020 Время: 10:00

УДК 621.039

Кинетическая модель эволюции жидких включений в соляных породах при высоких градиентах температуры

О.О. Корчагина

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

В качестве среды для создания подземных хранилищ радиоактивных отходов (РАО) рассматриваются залежи галитов. Обеспечение коррозионной безопасности таких хранилищ связано с недопущением попадания рассола, содержащегося в галитах в виде жидких включений в области с контейнерами, содержащими РАО.

В поле градиента температуры жидкие включения в соли мигрируют вдоль градиента, к источнику тепла. Растворимость соли во включениях рассола увеличивается с повышением температуры. Температура на поверхности включения ближе к источнику тепла больше, чем на поверхности вдали от источника. Следовательно, соль растворяется вдоль горячей поверхности включения и кристаллизуется вдоль холодной. Диффузия соли от горячей к холодной поверхности включения приводит к тому, что включение движется в противоположном направлении, то есть в направлении более высокой температуры. В результате зависимости скорости миграции от изотермического размера [1-3], жидкие включения способны коалесцировать друг с другом, образуя капли большего размера (Рис.1.). Кроме того, известно [1-3], что при достижении включения критического размера оно распадается. Этот изотермический критический размер зависит от значения градиента температуры.

Для описания эволюции ансамбля жидких включений с учетом коалесценции в монокристалле галита было получено уравнение типа Больцмана [4] для функции распределения в зависимости от изотермического размера и пространственного распределения включений с учетом мгновенного равновесного распада (1) частиц:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} - V_i \frac{\partial f_i}{\partial y} = -f_i \sum_{j=0}^I a_{ij} f_j + \sum_{j,k=0}^I a_{jk} f_j f_k \begin{cases} \Delta r \delta(R_j + R_k - R_i), & j+k < I+1 - \frac{r}{\Delta r} \\ \frac{1}{j+k+1}, & I+1 - \frac{r}{\Delta r} \leq j+k \leq I, \quad i = \overline{0, j+k} \\ \frac{1}{2I} + 1 - (j+k), & I < j+k < 2I, \quad i = \overline{j+k-I, I} \end{cases} \quad (1)$$

где f_i — функция распределения жидких включений в зависимости от изотермического размера R_i , $V = D \frac{C_l}{C_s} \left[\left(\frac{1}{C_E} \frac{\partial C_E}{\partial T} + \sigma \right) G_l - \frac{K_D + K_S}{(RT)L} \right]$ — скорость миграции [1], $a_{i,j} = \Delta r \pi (R_i + R_j)^2 |V_i - V_j|$,

$\pi(R_i + R_j)^2$ – эффективная площадь сечения взаимодействия включений, $R_{cr} = R_l = r + I\Delta r$ – критический изотермический размер включений, I – индекс максимального устойчивого включения.

Первый член справа в (1) отвечает за уменьшение количества включений со спектром R_i , второй – за увеличение количества включений. Изменение числа включений в первом члене происходит за счет коалесценции, во втором – за счет коалесценции устойчивых включений и распада неустойчивых. Считается, что при достижении включения критического размера R_{cr} , оно с равной вероятностью распадается на все возможные пары включений в спектре устойчивых

Задача для уравнения переноса с периодическими граничными условиями и равномерными начальными условиями по R и по Y (1) решалась с помощью разностной схемы «явный левый уголок». Согласно численным расчетам, полученным в результате решения кинетического уравнения с учетом пространственной зависимости функции распределения (1), в процессе термомиграции включения стремятся к определенному диапазону спектров изотермического размера. Со временем диапазон сужается и стремится к максимальному устойчивому размеру (Рис. 2.).

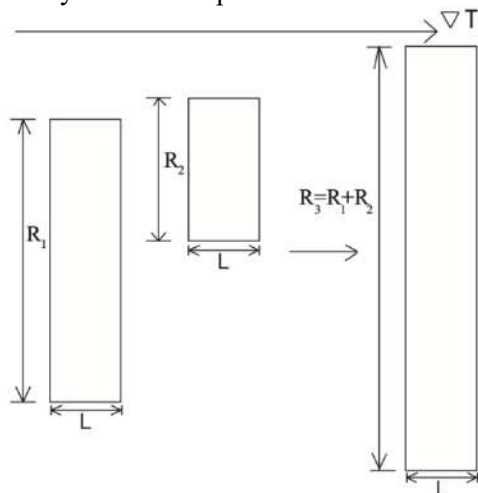


Рис.1. Процесс коалесценции включений

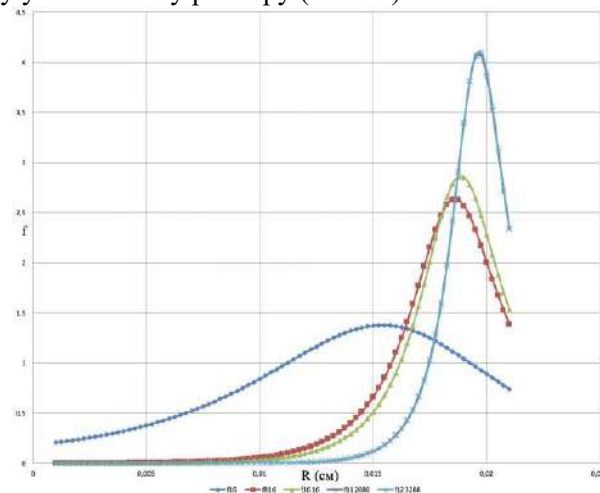


Рис.2. Зависимости $f(R)$ для разных значений времени

В таблице 1 представлены значения изотермических размеров, в разные моменты времени до установившегося режима.

$t(c)$	$4,8 \cdot 10^9$	$2,4 \cdot 10^{11}$	$4,8 \cdot 10^{11}$	$3,3 \cdot 10^{13}$	$3,7 \cdot 10^{13}$
R (см)	0,155	0,0185	0,01875	0,01975	0,01975
f_{max}	1,38	2,63	2,86	4,07	4,09

Таб. 1

Построена кинетическая модель термомиграции жидких включений с учетом коалесценции устойчивых включений и бинарного равновероятностного распада неустойчивых. В данной работе учитывается пространственная зависимость функции распределения. В рамках модели были проведены расчеты, результаты которых согласуются с экспериментами, описанными в [1,3].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 20-08-01192)

Литература

1. T. R. Anthony, H. E. Cline, "Thermal migration of liquid droplets through solid", Journal of Applied Physics 42, 3380-3387 (1971).
2. Thomas H. Pigford, "Migration of brine inclusions in salt, Nuclear Technology", Vol.56, 93-101, January (1982).
3. Я. Е. Гегузин, А. С. Дзюба и В. С. Кружанов, "Исследование поведения жидких включений в кристалле в поле температурного градиента", Кристаллография стр. 383- 390, (1975).
4. Е.М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, Теоретическая физика, Том X.

Корреляционные измерения расхода в каналах масштабных моделей элементов ЯЭУ с применением матричных кондуктометрических систем

А.Е. Хробостов, А.А. Баринев, И.А. Коновалов, А.А. Чесноков, М.А. Макаров, С.В. Исаева

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

Мировой рынок атомной энергетики проходит стадию трансформации. Все больше внимания уделяется вопросу надежности энергетических установок и безопасности обслуживающих систем. Одним из важных показателей работы реакторной установки является расход теплоносителя в элементах РУ. Примером является контроль объемного расхода теплоносителя в ядерных энергетических и технологических установках. Для наибольшей точности и обеспечения высокого уровня надежности необходимо проводить исследования на экспериментальных моделях.

На современном этапе развития известен корреляционный метод измерения расхода теплоносителя, широко применяемый для эксплуатационной диагностики ядерных энергетических установок. В его основе лежит анализ показаний детекторов гамма-излучения, обусловленного активацией изотопа N^{16} в нейтронном поле активной зоны [1]. Но для лабораторных исследований данный метод не применим из-за отсутствия необходимых радионуклидов в потоке.

Альтернативным решением для экспериментальных исследований является построение измерительной системы на базе применения сетчатых кондуктометрических датчиков (СКД) [2].

Ввиду этого, целью работы являлась отработка корреляционного метода измерения расхода теплоносителя с применением кондуктометрических систем, в которых в качестве трассера используется гидродинамически пассивная примесь. Измерения проводились при помощи метода кондуктометрии в квадратном канале с использованием двух последовательно установленных СКД с разрешением 8×8 ячеек [3]. За основу используемого метода измерения расхода было принято определение времени транспорта турбулентных пульсаций потока рабочей среды между двумя датчиками. При этом используется алгоритм вычисления положения максимума взаимно корреляционной функции (ВКФ) сигнала в измерительных ячейках кондуктометрических датчиков.

Задачей первого этапа при анализе полученных данных ставилась оценка влияния шума на результаты измерений. Далее, на основе анализа энергетического спектра пульсаций удельной электропроводимости (УЭП), делался вывод о наличии наводок и их характерных частотах. На основе полученных оценок, при дальнейшем анализе измерительного сигнала использовался цифровой фильтр нижних частот с соответствующими характеристиками.

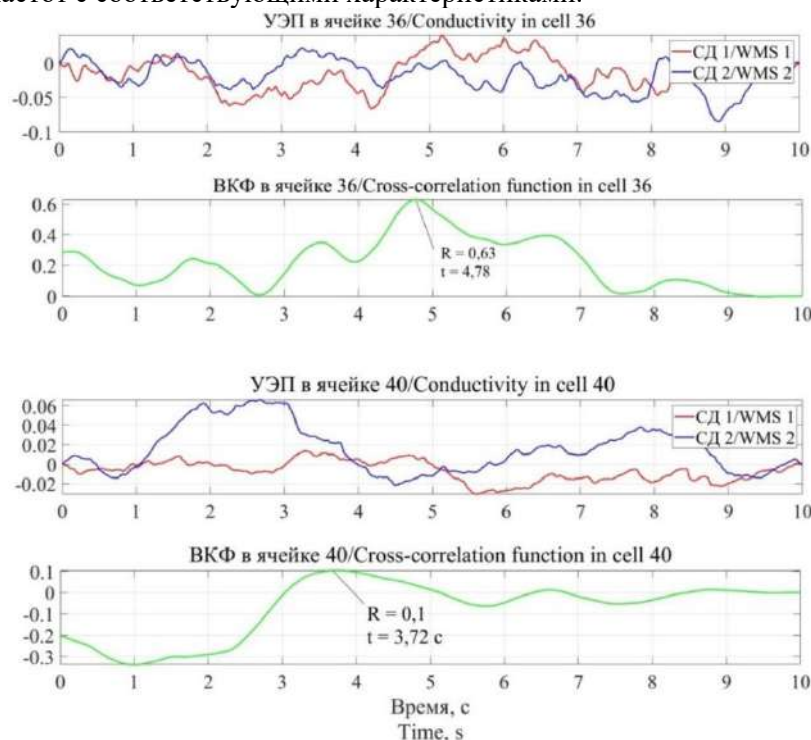


Рис. 1. Реализации УЭП и ВКФ при $Re=6300$ для центральных и периферийных ячеек

Результаты измерений дают приемлемое согласие с показаниями штатных расходомеров для характерных турбулентных режимов течения (погрешность измерения скорости потока при помощи кондуктометров составляет менее 5 %).

Проведенная в данной работе апробация метода корреляционного определения расхода теплоносителя на основе кондуктометрической измерительной системы для турбулентного потока в квадратном канале позволила применить данный метод для измерения поканальных расходов в масштабных моделях элементов и оборудования активной зоны ядерной энергетической установки.

Литература

1. *Mattson H*, Utilisation of N16 in Nuclear Power Plants / H. Mattson, F. Owrang, A. Nordlund // Department of Reactor Physics. Chalmers University of Technology, Gbteborg Sweden, 2003
2. *Prasser, H.M.* A new electrode-mesh tomograph for gas-liquid flows/H.M.Prasser, A. Bottger, J. Zschau // Flow Meas. Instrum. – 1998. – No. 9. – P. 111-119
3. *Хробостов А.Е.* Исследование гидродинамики стратифицированных турбулентных потоков для валидации расчетных подходов к моделированию тепловых процессов в оборудовании ЯЭУ / А.Е. Хробостов, М.А. Легчанов, Д.Н. Солнцев, А.А. Баринев, И.А. Коновалов, А.А. Чесноков, М.А. Макаров // Труды НГТУ им. Р.Е. Алексеева / НГТУ им. Р.Е. Алексеева. – Нижний Новгород, 2019 №3(126) – 187 с.

УДК 621.039

Определение гидродинамических характеристик в зоне смешения стратифицированных потоков с применением матричных кондуктометрических систем

А.Е. Хробостов, А.А. Баринев, И.А. Коновалов, А.А. Чесноков, М.А. Макаров, С.В. Исаева

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

Смешение неизотермических потоков является причиной различных негативных факторов, связанных с эксплуатацией ядерных установок с жидкими теплоносителями, в частности таких как термическая усталость конструкционных материалов ЯЭУ. Возникающая в ряде случаев стратификация турбулентного потока является сложным физическим явлением, от корректности моделирования которого зависит точность прогнозирования ресурса оборудования.

В работе проведена серия экспериментов по исследованию стратифицированного течения, образуемого смешением спутных турбулентных потоков. Эксперименты проводились при помощи кондуктометрических [1] и температурных датчиков, расположенных в нескольких сечениях исследуемой модели, что позволило получить пространственную картину распределения проводимостей и температур. Экспериментальная модель представляет собой канал квадратного сечения, в котором происходит смешение потоков с различными плотностями, обусловленными разницей температур, и различными удельными проводимостями, создаваемыми гидродинамически пассивной примесью. Режимные параметры выбраны близкими к реализованным в международном эксперименте GEMIX [2], для обеспечения сравнимости полученных результатов.

Экспериментальные данные включают в себя осредненные профили относительных концентраций, а также длительные реализации локальных температур и концентраций в точках измерения. Обработка экспериментальных данных позволила получить динамические оценки реализаций сигналов, позволяющие определить спектр энергетических пульсаций потока (рис.1), корреляционные функции, а также статистические характеристики.

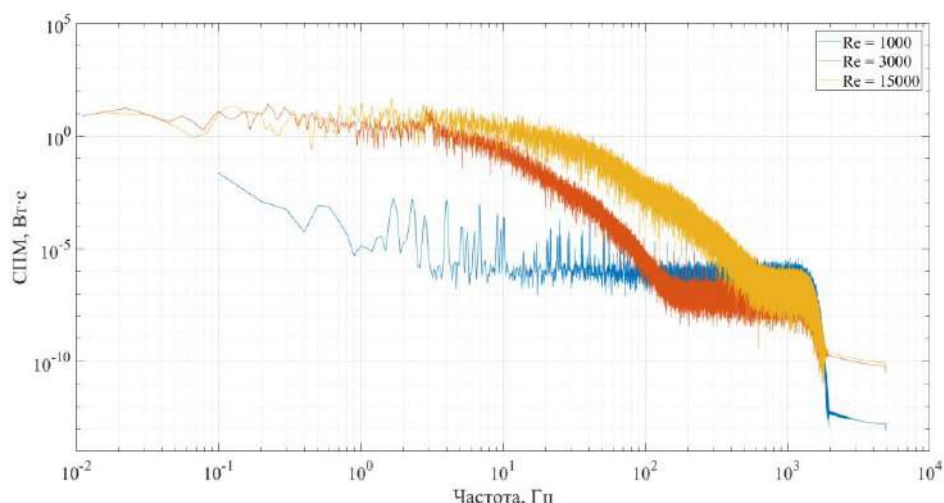


Рис. 1. Сводный график оценок спектральной плотности мощности для режимов с различными числами Рейнольдса

Литература

1. Prasser, H.M. A new electrode-mesh tomograph for gas-liquid flows/H.M.Prasser, A. Bottger, J. Zschau // Flow Meas. Instrum. – 1998. – No. 9. – P. 111-119
2. Fokken J. Stably stratified isokinetic turbulent mixing layers: comparison of PIV-measurements and numerical calculations / J. Fokken, R. Kapulla, S. Kuhn [etc.] // Fachtagung "Lasermethoden in der Strömungsmesstechnik" – 2009. – P. 8-10.

УДК 624.04.45.001.3

Особенности построения расчетной модели защитных оболочек при воздействии нагрузок внутри сечения стенки цилиндра

**В.Н. Медведев, А.С. Киселев, А.С. Киселев, В.Ф. Стрижов, А.Н. Ульянов,
М.И. Скорикова**

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

До настоящего времени при анализе НДС защитных оболочек не уделялось достаточно внимания особенностям воздействия криволинейных арматурных канатов располагаемых внутри сечения стенки оболочки. При применении арматурных канатов непрерывной навивки это воздействие было достаточно незначительным ввиду многоступенчатого подъема усилий в них и создания, таким образом, фонового обжатия конструкции, что значительно снижало возможность трещинообразования в бетоне.

В настоящее время стала применяться другая система преднапряжения защитных оболочек АЭС с ВВЭР-1000 французской фирмы "Фрейссине" на базе витых армоканатов в полиэтиленовой оболочке под названием СПЗО-М [Л.1], при которой натяжение выполняется сразу на полное усилие [Л.2-4]. Это обстоятельство создает опасность трещинообразования внутри стены из-за отсутствия фонового обжатия. Кроме того, из-за особенностей технологии монтажа арматурных элементов, при которой производится инъектирование каналаобразователей цементным раствором при давлении до 10 бар, существует возможность трещинообразования на этапе возведения.

Учитывая вероятность значительных концентраций напряжений в этих зонах, возникла необходимость создания расчетного аппарата для возможности оценки такого воздействия.

Была поставлена задача построения расчетной модели защитной оболочки, которая адекватно отображает различные особенности рассматриваемой конструкции, состоящей из разнородных материалов и имеющей сложную конфигурацию отдельных элементов.

В ходе работы был выполнен анализ особенностей создания предварительного напряжения защитной оболочки в случае применения системы преднапряжения СПЗО-М. Особенностью данной системы является необходимость создания в каждом арматурном элементе полного расчетного усилия единовременно и загрузка канала внутренним давлением при инъектировании цементным

раствором, что может вызвать значительные концентрации напряжений в сечении стенки и, как следствие, трещинообразование.

Разработана расчетная модель, учитывающая особенности сечения стенки защитной оболочки, в которой моделируется рядовая арматура с применением стержневых конечных элементов, работающих совместно с объемными конечными элементами, моделирующими бетон. Модель также включает каналообразователи, располагающиеся по винтовым линиям внутри стенки ЗО. Для решения проблемы совместимости сетки рядовой арматуры и сетки каналообразователей был разработан специальный алгоритм, не требующий совпадения сеток моделирующих арматуру и бетон «узел в узел».

Расчеты защитной оболочки при воздействии нагрузок действующих внутри стенки защитной оболочки АЭС с ВВЭР-1000 показали, что при инъектировании канала с давлением 1,0 МПа при нарушении его герметичности в бетоне перемычки между перекрещивающимися каналами могут образовываться трещины. В этой связи рекомендуется предъявлять повышенные требования к узлам соединения полиэтиленовых каналообразователей.

Поскольку при одновременном инъектировании срединного и наружного или внутреннего каналов уровень максимальных главных напряжений в зонах наиболее тонких перемычек бетона между перекрещивающимися каналами достигает предела прочности бетона на растяжение (2,0 МПа) необходимо исключить одновременное инъектирование срединного и наружного или внутреннего каналов.

Разработанная расчетная методика и модель позволяют приступить к выполнению расчетного анализа представленной проблемы.

Литература

1. *Медведев В.Н., Ульянов А.Н.* Сравнительный анализ систем предварительного напряжения защитных оболочек АЭС. – Известия высших учебных заведений. Северо-Кавказский регион. Технические науки. 2008. – Спецвыпуск – с. 99-105.
2. *Медведев В.Н., Ульянов А.Н., Киселев Александр С., Киселев Алексей С., Стрижов В.Ф.* О применении модернизированной системы преднапряжения СПЗО-М на защитных оболочках АЭС. Глобальная ядерная безопасность, 2012, № 2-3 (4), с. 20-26.
3. *Медведев В.Н., Киселев Александр С., Киселев Алексей С., Ульянов А.Н., Стрижов В.Ф., Потанов Е.А.* Натурные наблюдения на этапе строительства защитной оболочки энергоблока № 3 Ростовской АЭС. Глобальная ядерная безопасность. № 3 (12) 2014. с. 89-99.
4. Пучок арматурный для ЗО АЭС с ВВЭР-1000 В-320. Технические условия ФРТ.СПЗОМ.0АЭС.В2.МЗ.001.01-06. М. 2006.

УДК 621.039

Оценка доверительного интервала при определении положения максимума взаимно-корреляционной функции применительно к корреляционному методу измерения скорости потока теплоносителя при исследовании гидродинамики турбулентных потоков

А.Е. Хробостов, А.А. Баринов, И.А. Коновалов, А.А. Чесноков, М.А. Макаров, С.В. Исаева

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

В энергетическом машиностроении широко известен метод корреляционного определения скорости потока. Адаптация данного метода с применением пространственных кондуктометрических систем [1] позволяет проводить измерения расхода теплоносителя при исследованиях гидродинамических процессов в масштабных моделях ядерных энергетических установок. Идеология данного метода заключается в определении максимума взаимной корреляции измерительных сигналов кондуктометрических датчиков как времени прохождения турбулентных структур в потоке между ними. При этом встает вопрос об оценке погрешности определения максимума взаимно-корреляционной функции (ВКФ) под влиянием присутствующих в регистрируемом сигнале помех.

В работе представлены результаты серии экспериментов, направленных на оценку доверительного интервала положения максимума ВКФ при корреляционном измерении расхода с применением пространственных кондуктометрических датчиков. Экспериментальные данные включают

в себя длительные реализации пульсаций удельной электропроводимости в зоне смешения экспериментального участка, представляющего собой канал квадратного сечения. В ходе анализа экспериментальных определялись ВКФ сигналов, оценки спектральной плотности мощности, осредненные по методу модифицированной периодограммы Уэлча [2], а также статистические данные.

Оценка доверительного интервала положения максимума ВКФ производилась согласно методике, изложенной в [3]. На первом этапе, на основе анализа энергетического спектра пульсаций УЭП в зоне смешения определялась ширина полосы пропускания полезного сигнала B , затем производилась оценка сигнал/шум (M/S и N/S) для первого и второго датчиков соответственно. Далее производилась оценка нормированной среднеквадратичной ошибки ВКФ:

$$\varepsilon^2[R_{xy}(\tau)] = \frac{1}{2BT} (2 + (M/S) + (N/S) + (M/S)(N/S)) \quad (1)$$

здесь T - длительность реализации в секундах

Далее производилась оценка величины среднеквадратичного отклонения:

$$\sigma_i(\tau) \approx (\varepsilon^2[R_{xy}(\tau)])^{1/4} \quad (2)$$

В свою очередь 95% процентный доверительный интервал положения экстремума корреляционной функции определялся как $[-2 \cdot \sigma_i(\tau) \leq \tau \leq 2 \cdot \sigma_i(\tau)]$.

Полученные аналитическим путем значения о положениях экстремумов корреляционных функций позволяют судить о высокой степени точности результатов корреляционного измерения расхода, полученных в [1].

Литература

1. Konovalov I.A., Khrobostov A.E., Legchanov M.A., Solncev D.N., Barinov A.A., Ryazanov A.V., Chesnokov A.A., Makarov M.A. Application of the Correlation Velocity Measurements for Hydrodynamic Investigations of Turbulent Coolant Flow in Nuclear Reactor Elements. Devices and Methods of Measurements. 2020;11(3):196-203. <https://doi.org/10.21122/2220-9506-2020-11-3-196-203>
2. Снегирёв А.Ю. Высокопроизводительные вычисления в технической физике. Численное моделирование турбулентных течений: Учебное пособие. - СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. - 143 с
3. Бендат Дж., Пирсол А. Прикладной анализ случайных данных: Пер. с англ. - М.: Мир, 1989. - 540 с., ил. ISBN 5-03-001071-8

УДК 538.931

Перенос примеси в двухпористых средах в присутствии удаленного адвективного канала

П.С. Кондратенко, К.В. Леонов

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук

Одной из причин возникновения неклассических режимов переноса в геологических формациях является неоднородная резко-контрастная структура среды [1,2]. В настоящей работе рассмотрены режимы переноса примеси в адвективном канале, удаленном от источника примеси, который расположен в статистически однородной двухпористой сорбирующей среде (матрице), которая представляется как совокупность двух подсистем: 1) хорошо проницаемых каналов, соответствующих сетке трещин и 2) слабопроницаемых пористых блоков, заполняющих пространство между каналами (трещинами). Обе подсистемы пропитаны влагой, что обеспечивает перенос примеси в среде. Основным механизмом переноса примеси в матрице на большие расстояния является диффузия-адвекция по сетке трещин, в то время как пористые блоки играют роль ловушек тормозящих перенос. В адвективном канале основным механизмом переноса является адвекция.

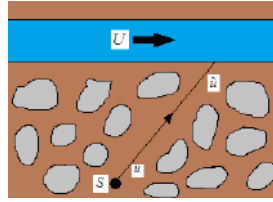


Рис. 1. Геометрия задачи. S - источник примеси, u - скорость начальная, $\tilde{u}$ - скорость перенормированная за счет взаимодействия с блоками, U - скорость в канале.

На Рис. 1 схематически изображена бесконечно протяженная пространственная область, по которой происходит перенос примеси. Уравнения диффузии-адвекции для канала и матрицы имеют следующий вид

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = q(t) \delta(x); \\ \frac{\partial n}{\partial t} + \tilde{u} \nabla n - d \Delta n = -Q, \end{cases} \quad (1)$$

где $C = C(x, t)$ - концентрация примеси, проинтегрированная по поперечному сечению канала, x - координата вдоль скорости течения в канале U , $q(t)$ - эффективный источник примеси для канала, $\delta(x)$ - дельта-функция, n - концентрация примеси в матрице, $\tilde{u}$ - скорость адвекции в матрице ($u \ll U$), d - коэффициент диффузии в матрице, величина Q описывает обмен частицами примеси между трещинами и блоками. Неравенство $u \ll U$ позволило свести задачу в матрице к одномерной и воспользоваться граничным условием:

$$n(\xi, t) \Big|_{\xi=h} = 0. \quad (2)$$

Здесь ξ - это координата вдоль усредненной скорости адвекции в матрице, h - расстояние от источника примеси до канала вдоль скорости $\tilde{u}$. Предполагается, что источник примеси является точечным и задан начальным условием:

$$\begin{cases} C(x, 0) = 0; \\ n(\xi, 0) = N_0 \delta(\xi), \end{cases} \quad (3)$$

здесь N_0 - это число частиц примеси в начальный момент времени.

Решение второго уравнения в системе (1) позволяет найти выражение для эффективного источника примеси для канала $q(t)$, который фигурирует в первом уравнении этой системы:

$$q(t) = \left(u - d \frac{\partial}{\partial \xi} \right) n(\xi, t) \Big|_{\xi=h}. \quad (4)$$

Решением уравнения (4) является выражение

$$C(x, t) = \frac{1}{U} q(t') \theta(x) \theta(t'), \quad t' = t - \frac{x}{U}, \quad (5)$$

где $\theta(z)$ - функция Хэвисайда ($\theta(z) = 1$ при $z > 0$ и $\theta(z) = 0$ при $z < 0$). Функцию $q(t)$ можно представить в виде:

$$\begin{aligned} q(t) &= N_0 \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp[-\Gamma(p) + pt], \quad \text{Re } a > 0, \\ \Gamma(p) &= h \left(\sqrt{\frac{t_u^{-1} + p + \Lambda(p)}{d}} - \frac{u}{2d} \right), \quad t_u = 4d/u^2, \end{aligned} \quad (6)$$

здесь p - переменная Лапласа, функция $\Lambda(p)$ отвечает за обмен примесью между блоками и трещинами и определена в работе [2]. Распределение концентрации примеси в канале состоит из основной части и предвестника, состоящего из нескольких ступеней по числу режимов переноса в матрице. В основной части распределения концентрация в канале определяется выражением

$$C(x, t) \approx \frac{N_0 \tilde{u}^3}{\sqrt{4\pi \tilde{d} h}} \exp \left[-\frac{(h - \tilde{u}t')^2}{4\tilde{d} \frac{h}{\tilde{u}}} \right], \quad (7)$$

где $\tilde{d} = d\sqrt{t_a/t_b}$ - коэффициент диффузии в пористых блоках, $\tilde{u} = u\sqrt{t_a/t_b}$ - это перенормированная скорость за счет взаимодействия с блоками, t_a - время, за которое примесь проникла в блоки на расстояние порядка размера трещин, t_b - это время, за которое примесь из трещин почти заполнила весь объём блоков и находится в обменном равновесном состоянии. Далее рассмотрим только один из вариантов иерархии времен характеризующих матрицу:

$$t_u \ll t_a \ll t_b. \quad (8)$$

Тогда с точностью до преэкспоненциальных множителей концентрация в двух ступенях предвестника в порядке их удаленности от основной части распределения концентрации в канале определяется соотношениями:

- Квазидиффузионная ступень

$$C(x, t) \propto \exp \left[-\frac{h^2}{4u^2 t_a t'} \right] \quad \text{при} \quad \frac{h}{2u} \ll t' \ll \frac{h}{2u} \sqrt{\frac{t_b}{t_a}} \quad (9)$$

- Классическая диффузионная ступень

$$C(x, t) \propto \exp \left[-\frac{h^2}{4dt'} \right] \quad \text{при} \quad t' \ll \frac{h}{2} \sqrt{\frac{t_a}{d}} \quad (10)$$

В результате в отношении формы зависимости от координат, концентрации на далеких расстояниях являются многоступенчатыми. Ступени формируются режимами переноса по принципу: чем более далекая ступень, тем более ранний режим ей соответствует.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-08-01229 а).

Литература

1. Bolshov L., Kondratenko P., Pruess K. et al., Nonclassical Transport Processes in Geologic Media: Review of Field and Laboratory Observations and Basic Physical Concepts // Vadose Zone Journal, 2008, V. 7, No. 4, P. 1181-1190.
2. Матвеев Л.В., Перенос примеси в трещиновато-пористой среде с сорбцией // ЖЭТФ 2012, том 142, вып. 5, стр. 943-950.

УДК 621.039.534

Проблемные аспекты теплотехнической надёжности ядерной энергетической установки с газовой системой компенсации объема

Д.И. Новиков, А.А. Сатаев, Н.В. Герман, Е.Д. Ермоленко, В.В. Андреев

ФГБОУ ВО «Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева»

Отечественные судовые ядерные энергетические установки включают в свой состав газовую систему компенсации объема (далее СКО). Стоит отметить, что в большой энергетике и у зарубежных коллег, используется другой тип системы компенсации объема, а именно – паровой. Этот тип системы имеет относительно простой принцип работы и является всесторонне отработанным, однако имеется ряд существенных недостатков [1].

Температура рабочего тела СКО составляет около 50°C. Вследствие маневровых режимов, осуществляется постоянный массообмен между объемом первого контура реакторной установки и объемом заливки бака компенсации. В результате, в узлах подвода и трубных коммуникациях возникают значительные термоциклические нагрузки. Особенно болезненно это переносят сварные швы, в которых свойство металла деградированы. Эта проблема на текущий момент решается технически – установкой тепловых экранов внутри коммуникаций, а также, промежуточной ёмкости в самом компенсаторе (либо вынесена за его пределы). Так же в результате массообмена в горизонтальных участках трубопровода имеет место температурная стратификация. Так для трубопровода ДУ100, достигается градиент температуры в ≈50°C.

Одна из нерешенных проблем газовой компенсации – насыщение теплоносителя азотом. Растворимость газа подчиняется закону Генри. Если построить кривую растворимости азота [2] при давлении первого контура, можно убедиться, что газ, растворённый в объеме при температуре равной рабочей температуре СКО ($\approx 50^\circ\text{C}$), выделится из объема при температурах около 80°C и при температурах близких к температуре насыщения теплоносителя. Это значит, что газ выделится в холодильнике ионообменного фильтра и в пристенном слое тепловыделяющего элемента.

Уже имеются данные, которые свидетельствуют от негативного влияния выделяющегося газа на работоспособность оборудования первого контура (прим. расходомер ЦНР) [3]. Так же стоит отметить влияние растворенного газа на теплотехническую надёжность. Газовыделение на теплообменных поверхностях приводят к локальной термоциклике греющей поверхности и к снижению критического теплового потока [4].

Интерес представляет экспериментальное исследование влияния газовой выделении на процесс теплопередачи. Работа подобного типа, с теоретической выкладкой, была проделана и описана в труде [2].

Наша работа имеет иной подход. Целесообразно разделить теплообмен при газовой выделении в ядре потока и при выделении на теплообменных поверхностях. На текущем этапе был создан стенд позволяющий создавать газовой выделение в ядре потока и оценивать влияние этого процесса на коэффициент теплоотдачи. Выделение газа достигается за счет установки сужающего сопла. Такое решение взято из соображений о размере газовых пузырей.

Было получено, что газовой выделение в ядре потока (если поток является теплоносителем) увеличивает коэффициент теплоотдачи на $\approx 11\%$. Если газ выделяется в потоке, который получает тепло, то теплообмен ухудшается.

Литература

1. *Зверев Д.Л., Пахомов А.Н., Полуничев В.И., Вешняков К.Б., Кабин С.В.* Реакторная установка нового поколения РИТМ-200 для перспективного атомного ледокола // Атомная энергия. — 2012. — Т. 113, вып. 6. — С. 323-328
2. *Бараненко, В. И.* Термодинамика и теплообмен в ЯЭУ с газонасыщенным теплоносителем / В. И. Бараненко, В. Г. Асмолов, В. С. Киров. — Москва: Энергоатомиздат, 1993. — 272 с. — Текст: непосредственный.
3. *А.Ф. Филимонов, В.И. Полуничев, А.Е. Помысухина* Газовыделение и газоперенос в оборудовании первого контура реакторной установки с газовой системой компенсации давления // Труды НГТУ им. Р.Е. Алексеева. — 2019. — № 3. — С. 101-110.
4. *Н. В. Васильев, Ю. А. Зейгарник, К. А. Ходаков, В. М. Федюленко.* О природе «газового» кризиса кипения // ТВТ. — 2015. — Т. 53, вып. 6. — С. 881-884.

УДК 621.039

Разработка конструкции исследовательского реактора на основе ТВС реактора ВВЭР-440

Д.Г. Лазаренко¹, Г.Е. Лазаренко²

¹Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

²Обнинский институт атомной энергетики – филиал НИЯУ «МИФИ»

Развитие национальных программ невозможно без наличия действующего ядерного реактора, позволяющего как осуществить подготовку национальных кадров, так проводить исследования по широкому спектру прикладных задач в области ядерной физики, радиационной химии, материаловедения, биологии и медицины. Наиболее доступным как по цене, так по сложности обслуживания, является водо-водяной реактор (ВВР) бассейнового типа с водой под атмосферным давлением, хорошо зарекомендовавший себя как с точки зрения эксплуатационных характеристик, так и с точки зрения безопасности [1]. Существующие ВВР строились как специализированные аппараты, в результате чего предпочтение отдавалось не универсальности характеристик, а форсированию их в определенных направлениях (в частности, повышение плотности потока нейтронов) [2]. Результатом такого подхода явилось то, что относительно дешевого аппарата с универсальными потребительскими характеристиками не существует.

Для продвижения на мировой рынок специализированного многопрофильного технологического реактора с возможностью первичного обучения персонала и проведения как технологических, так и медицинских исследований и процедур, необходимо создать реактор, удовлетворяющий требованиям экспортоориентированности.

Конструкция реактора представлена на рис.1. Реактор выполнен по интегральной схеме. Корзина реактора размещена по центру колодца реактора. Колодец реактора на двух уровнях разгорожен экранами, препятствующими прямому подъему теплоносителя к поверхности. Из корзины реактора теплоноситель попадает в перепускной канал, затем в центральный отсек колодца, далее в теплообменники и через них выводится под нижний экран, откуда поступает в активную зону. Назначение экранов – исключить попадание активированного теплоносителя на дневную поверхность с временным интервалом менее 3 мин после прохождения активной зоны для распада короткоживущего радиоактивного изотопа азота. Циркуляция теплоносителя происходит за счет естественной термогравитационной конвекции, режим течения – ламинарный (в активной зоне – вязкостно-гравитационный). ТВС удерживаются в стаканах опорной плиты цангами с запирающими механизмами, что позволило отказаться как от пакетов труб, фиксирующих ТВС в ВВЭР-440, так и от опрокинутой циркуляции теплоносителя, принятой в ВВР.

Модификация ТВС ВВЭР-440 [3] затронула в основном нижний хвостовик. В варианте для ИР нижний хвостовик заменен на фиксируемую головку ТВС, аналогичную верхней головке ТВС ВВЭР-440. 3D- модель ТВС представлена на рис.2.

ТВС содержит верхнюю и нижнюю головки с посадочными проточками под цанги. В непосредственной близости от головок размещены верхняя и нижняя трубные доски. Радиальная фиксация твэл осуществляется тремя дистанционирующими решетками. Поскольку внешняя радиальная фиксация ТВС отсутствует, зазоры между ТВС удерживаются боковыми дистанционаторами в виде подпружиненных штоков с полукруглыми головками, симметрично размещенными по три штуки на каждой верхней головке. На нижней головке боковые дистанционаторы отсутствуют. Габариты центральной части ТВС полностью соответствуют принятым для ВВЭР-440, за исключением длины топливных сердечников, которая уменьшена до 1075 мм.

ТВС крепится на цанге, зажатой в стакане опорной плиты реактора. Лепестки цанги входят в проточку нижней головки и фиксируются в ней в разжатом положении кольцевым фиксатором, закрепленном на подпружиненном штоке, пропущенном через центральную трубу ТВС и снабженном захватом выше верхней трубной доски. Извлечение/установка ТВС возможны только при поднятом за захватную головку штоке запорного механизма.

Выполненное 3D-макетирование показало возможность создания ИРК на основе ТВС энергетического реактора ВВЭР-440 с заданными техническими характеристиками.

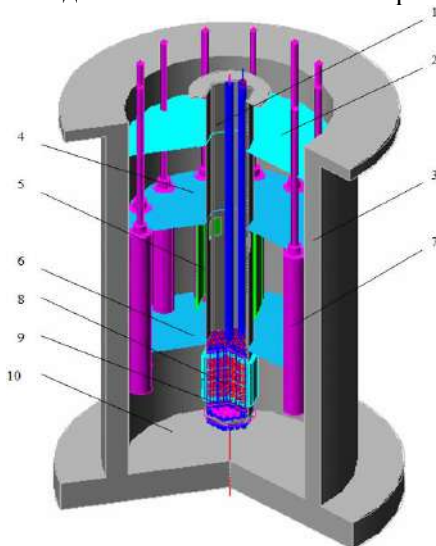


Рис.1. Конструкция реактора: 1 – корзина реактора, 2 – уровень теплоносителя, 3 – колодец реактора, 4 – верхний экран, 5 – перепускной канал, 6 – нижний экран, 7 – теплообменник, 8 – активная зона, 9 – опорная плита, 10 – фундаментная плита.

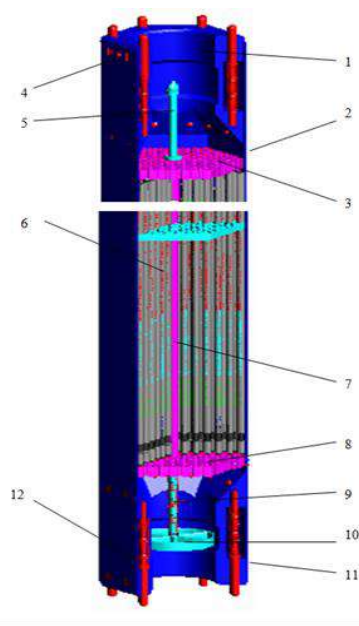


Рис.2. Конструкция ТВС: 1 – верхняя головка, 2 – оболочка ТВС, 3 – верхняя трубная доска, 4 – боковой дистанционер, 5 – шток запорного устройства, 6 – твэл, 7 – центральная труба, 8 – нижняя трубная доска, 9 – распорная пружина, 10 – фиксатор, 11 – нижняя головка, 12 – демпфер – азимутальный фиксатор

Литература

1. Третьяков И.Т., Романова Н.В., Соколов С.А. и др. Новые проекты для исследовательских реакторов / Материалы 3-й Международной конференции «Инновационные проекты и технологии ядерной энергетики», 2014, стр. 168-177.
2. Бать Г.А., Коченов А.С., Кабанов Л.П. Исследовательские ядерные реакторы: Учеб. пособие для вузов. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 280 с.
3. Дементьев Б.А. Ядерные энергетические реакторы. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 352 с.

УДК 621.039

Расчет замедлителя нейтронного конвертора («Тепловой колонны»)

Е.Д. Ермоленко, Н.В. Герман, В.В. Андреев

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева
Институт ядерной энергетики и технической физики им. академика Ф.М. Митенкова

Универсальный нейтронный конвертор («тепловая колонна») был разработан при совместной работе ОАО «ОКБМ Африкантов» и НГТУ им Р. Е. Алексеева в 2009 году. Эта лабораторная установка предназначена для выполнения научно-исследовательских работ, таких как: определение изотопного состава делящихся материалов, исследование локальных возмущений нейтронного потока и т.п. [1] Опыты и исследовательские работы, проводимые с нейтронным конвертором на сегодняшний день актуальны и востребованы в индустрии ядерной энергетики. С его помощью исследуется взаимодействие с немоноэнергетическим потоком нейтронов некоторых объектов (живых организмов, конструкционных материалов, различных электронных устройств). В процессе создания вышеупомянутой «тепловой колонны» учитывался ряд ограничений, связанных с обеспечением требований безопасности для научного персонала, а также с массовыми и габаритными характеристиками установки.

Цель исследования заключается в нахождении экономически наиболее выгодной комбинации материалов замедлителя в составе конструкции нейтронного конвертора. Расчеты проводились в программах DOT-III и DOTGeom, с использованием библиотеки констант CASK-40, с предварительно обозначенным условием – толщина биологической защиты должна быть такой, чтобы мощность суммарной дозы нейтронного и гамма-излучений за пределами корпуса не превышала допустимую норму [2]. Материалы, используемые в качестве замедлителя в конвертере, выбираются из

очевидных соображений: ядра замедлителя должны обладать малой массой, для наиболее эффективного снижения энергии и скорости нейтронов. Исходные данные были следующие: характеристики плутоний-бериллиевых источников нейтронов с мощностью $3 \cdot 10^9$ нейтронов/с; материал корпуса и обечайки – сталь. Выбор комбинации материалов для замедлителя конвертера производился из следующих сочетаний: “графит – парафин”, “полиэтилен – графит”, “вазелин – графит”, “бетон – полиэтилен”. Для каждой из комбинаций были выполнены 20 вариантов расчетов конструкций установки с помощью расчетных программ. Варианты расчетов отличались между собой шагом толщины каждого из материалов, с выполнением поставленного условия по величине излучения за пределами корпуса. После выявления самого выгодного соотношения толщин материалов замедлителей для каждой из указанных комбинаций был проведен сравнительный анализ этих данных между собой. Получен следующий вывод: оптимальным сочетанием материалов, удовлетворяющим поставленной цели, является пара “графит – парафин”. Выбор этого сочетания обоснован и тем, что проблем с технической реализацией и обеспечением безопасности нейтронного конвертера в случае использования этих материалов не возникнет.

Литература

1. Андреев В.В., Андреев Н.Г., Кувшинова А.А., Леванов С.Л., Худяков И.С. Расчётно-теоретическое обоснование конструкции нейтронного конвертера/ Труды НГТУ им. Р.Е. Алексеева. - 2018.-№3 (122) – С. 37-45.
2. Андреев В.В., Андреев Н.Г., Галстян К.Г., Леванов С.Л. Обоснование радиационной безопасности нейтронного конвертера на всех этапах жизненного цикла в рамках проектно-ориентированного обучения студентов НГТУ им. Р.Е. Алексеева/ Научно-технический вестник Поволжья.- 2019.-№3- С.99-101.

УДК 531.011

Сравнение аналитических и нейросетевой моделей разрушения гранита

Р.А. Бутов

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Рассмотрены аналитические и нейросетевая модель разрушения гранита. Аналитические модели (Mohr-Coulomb, Modified Lade, Drucker-Prager, Hoek-Brown и 3D Hoek-Brown) были выбраны согласно [1] как наиболее точно описывающие экспериментальные данные. В качестве нейросетевой модели был выбран многослойный персептрон.

Экспериментальные данные получают на установках одноосного, двухосного и трехосного сжатия. Цилиндрический или кубический образец гранита нагружается до момента его разрушения (как правило образования сквозной трещины). Зафиксированные при этом усилия считаются предельными (предел прочности). В процессе эксперимента, рассматривается множество комбинаций предельных усилий. В результате получается набор векторов-точек с предельными значениями усилий (напряжений) по осям, например при трехосных испытаниях (Рис. 1). Полученные экспериментальные точки можно аппроксимировать некоторой поверхностью. Модели разрушения описывают различные поверхности разрушения в пространстве напряжений.

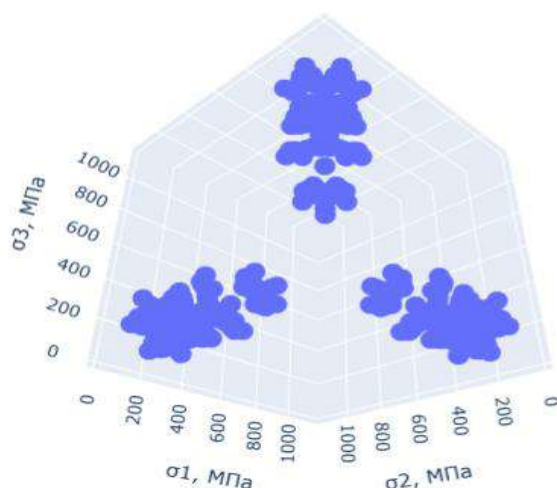


Рис. 1. Результаты трехосных испытаний на прочность

Существует десятки моделей разрушения, для сравнения было выбрано 5 аналитических моделей, наиболее точно описывающих разрушение гранита согласно [1]. Параметры моделей подбирались перебором с шагом 1 МПа и 1°.

1. Mohr-Coulomb (MC)

$$\tau = \sigma \tan(\varphi) + c \quad (1)$$

$$\tau = 0.5(\sigma_1 - \sigma_3) \cos(\varphi) \quad (2)$$

$$\sigma = 0.5(\sigma_1 + \sigma_3) + 0.5(\sigma_1 - \sigma_3) \sin(\varphi) \quad (3)$$

2. Modified Lade (ML)

$$(I'_1)^3 / I'_3 = 27 + \eta \quad (4)$$

$$I'_1 = (\sigma_1 + S_1) + (\sigma_2 + S_1) + (\sigma_3 + S_1) \quad (5)$$

$$I'_3 = (\sigma_1 + S_1)(\sigma_2 + S_1)(\sigma_3 + S_1) \quad (6)$$

$$S_1 = c / \tan(\varphi) \quad (7)$$

$$\eta = 4 \tan^2(\varphi) (9 - 7 \sin(\varphi)) / (1 - \sin(\varphi)) \quad (8)$$

3. Drucker-Prager (DP)

$$\sqrt{J_2} = k + \alpha J_1 \quad (9)$$

$$J_1 = 1/3(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \quad (10)$$

$$J_2 = 1/6[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2] \quad (11)$$

$$\alpha = 3 \sin(\varphi) / \sqrt{9 + 3 \sin^2(\varphi)} \quad (12)$$

$$k = 3c \cos(\varphi) / \sqrt{9 + 3 \sin^2(\varphi)} \quad (13)$$

4. Hoek-Brown (HB)

$$\sigma_1 = \sigma_3 + \sigma_c \sqrt{m \sigma_3 / \sigma_c + s} \quad (14)$$

$$m = 27 \quad (15)$$

$$s = 0.5 \quad (16)$$

5. 3D Hoek-Brown (3DHB)

$$9/(2\sigma_c) \tau_{oct}^2 + 3/(2\sqrt{2}) m \tau_{oct} - m \sigma_{m.2} = s \sigma_c \quad (17)$$

$$\tau_{oct} = 1/3 \sqrt{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2} \quad (18)$$

$$\sigma_{m.2} = 0.5(\sigma_1 + \sigma_3) \quad (19)$$

$$m = 27 \quad (20)$$

$$s = 0.5 \quad (21)$$

Описание параметров приведено в таблице 1.

Символ	Описание	Единица измерения
τ	касательное напряжение	МПа

σ	нормальное напряжение	МПа
c	когезия	МПа
φ	угол внутреннего трения	° или радиан
$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$	наибольшее, среднее и наименьшее главное напряжение (по убыванию значения)	МПа
σ_c	прочность на одноосное сжатие	МПа
m	коэффициент материала из моделей НВ (для гранита от 22 до 33)	
s	коэффициент поврежденности материала из моделей НВ (от 0 - полностью разрушенный до 1 - нетронутый)	

Таб.1. Параметры моделей

Нейросетевая модель выполнена с использованием многослойного персептрона с одним скрытым слоем из 300 нейронов. На вход подавался вектор напряжений. На выход подавался скаляр (1 подачи на вход вектора разрушения, 0 в случае нулевой нагрузки по всем осям и от 0 до 1 в других случаях). Функцией ошибки было выбрано квадратичное отклонение. Подбор параметров модели проводился методом градиентного спуска с оптимизатором Adam.

Подбор параметров проводился на 5 случайных разбиений данных на тестовую (25%) и обучающую (75%) часть. Результаты сравнения моделей по различным метрикам, усредненным по разбиениям приведены в таблице 2.

Модель	Train MAE, МПа	Train RMS, МПа	Test MAE, МПа	Test RMS, МПа	c , МПа	φ , °	σ_c , МПа
MC	5.40	6.39	5.92	6.77	4	30	-
ML	269	338	246	306	32.2	49	-
DP	146	161	130	144	1815	85	-
HB	145	154	130	145	-	-	252
3DHB	1555	1793	1414	1589	-	-	2000
MLP	11.4	37.2	7.86	8.96	-	-	-

Таб.2. Train - обучающая выборка, Test - тестовая выборка, RMS - корень из средней квадратической ошибки, MAE - средняя абсолютная ошибка.

Литература

1. *Bahrami, Babak, et al.* "Quantitative comparison of fifteen rock failure criteria constrained by polyaxial test data." Journal of Petroleum Science and Engineering 159 (2017): 564-580.
2. *Ghanizadeh, Ali Reza, et al.* "Modeling of bentonite/sepiolite plastic concrete compressive strength using artificial neural network and support vector machine." Frontiers of Structural and Civil Engineering 13.1 (2019): 215-239.
3. *Mishra, Deepak Amban, and Ivan Janeček.* "Laboratory triaxial testing—From historical outlooks to technical aspects." Procedia engineering 191 (2017): 342-351.
4. *Li, Diyu, et al.* "Triaxial Loading and Unloading Tests on Dry and Saturated Sandstone Specimens." Applied Sciences 9.8 (2019): 1689.
5. *Nasseri, M. H. B., et al.* "3-D transport and acoustic properties of Fontainebleau sandstone during true-triaxial deformation experiments." International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences 69 (2014): 1-18.
6. *Zhang, Shihuai, Shunchuan Wu, and Guang Zhang.* "Three-Dimensional Strength Characteristics of Zigong Sandstone Under True Triaxial Stresses." ISRM International Symposium-10th Asian Rock Mechanics Symposium. International Society for Rock Mechanics and Rock Engineering, 2018.

7. Yin, Jian-Hua, et al. "New mixed boundary, true triaxial loading device for testing three-dimensional stress–strain–strength behaviour of geomaterials." Canadian geotechnical journal 47.1 (2010): 1-15.
8. Zhang, Lianyang. "A generalized three-dimensional Hoek–Brown strength criterion." Rock mechanics and rock engineering 41.6 (2008): 893-915.

УДК 621.039

Экспериментальные исследования для валидации расчетных моделей процессов неравновесного газовыделения применительно к элементам ЯЭУ с газовой системой компенсации давления

А.Е. Хробостов, А.А. Баринов, И.А. Коновалов, А.А. Чесноков, М.А. Макаров, С.В. Исаева

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

Одной из наиболее важных задач современной атомной энергетики является обеспечение надежной и безопасной эксплуатации энергоблоков атомных станций (АС). Среди ключевых позиций в вопросах обеспечения безопасности находится рассмотрение аварийных режимов эксплуатации ЯЭУ, которые в некоторых случаях могут быть сопряжены с разгерметизацией 1 контура (аварии типа LOCA) [1]. Вызванная этим декомпрессия оказывает значительное влияние на стабильность работы главных циркуляционных насосов [2], а также на состояние всего контура в целом, что обусловлено выделением растворенных в теплоносителе газов. В связи с этим, расчетные и экспериментальные исследования, направленные на изучение гидродинамических процессов, происходящих при неравновесном газовыделении, являются актуальной задачей.

В рамках данной работы была создана демонстрационная экспериментальная установка, а также проведена серия экспериментальных исследований, направленных на валидацию расчетных моделей гидродинамических процессов, происходящих при неравновесном газовыделении. Исследуемый участок представляет собой вертикальную колонну, заполняемую предварительно деаэрированной водой под давлением до 1 МПа. В качестве выделяемого газа используется CO₂, градиент концентрации создается за счет градиента растворимости CO₂ при различном давлении столба жидкости по высоте экспериментального участка, составляющей 6 м. Насыщение жидкости CO₂ осуществляется в сосуде под давлением. Для создания пузырей CO₂ малого диаметра [3] используется дроссельная шайба на линии сосуд – модель, на которой происходит частичное выделение растворенного газа. Затем полученная двухфазная смесь поступает в экспериментальный участок, где происходит растворение CO₂ под давлением, создаваемым столбом жидкости. Затем инициируется процесс газовыделения в исследуемом участке.

Измерения проводились при помощи кондуктометрических датчиков [4] (ввиду значительно различающихся проводимостей жидкой и газовой фаз), установленных на фиксированном расстоянии вдоль исследуемого участка, что позволило оценить время распространения двухфазной области между соседними датчиками.

Полученные данные планируется использовать для валидации моделей растворения-выделения неконденсирующихся газов, которые реализованы в различных системных кодах и CFD-программах

Литература

1. Бараненко В.И., Асмолов В.Г., Киров В.С. Термодинамика и теплообмен в ЯЭУ с газонасыщенным теплоносителем. – 1993 – Москва. Энергоатомиздат. 1993 -272 с.: ил. ISBN 5-283-03846-7
2. Besagni G. Two-phase bubble columns: a comprehensive review. Chemengineering – 2018. – No.2. – P. 5-79.
3. Гегузин Я.Э. Пузыри. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1985. – 176 с. – (Библиотечка «Квант». Вып. 46.)
4. Prasser, H.M. A new electrode-mesh tomograph for gas-liquid flows/H.M.Prasser, A. Bottger, J. Zschau // Flow Meas. Instrum. – 1998. – No. 9. – P. 111-119

Экспериментальные подходы к оценке разрешающей способности сетчатых кондуктометрических датчиков

А.Е. Хробостов, А.А. Баринов, И.А. Коновалов, А.А. Чесноков, М.А. Макаров, С.В. Исаева

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

В исследовательской практике для изучения характеристик турбулентных потоков широкое распространение получили трассерные методы измерений. Основное требование таких методов – наличие некоторой пассивной скалярной функции, конвективный переносимой вместе с текущей средой. При этом измерительной системой регистрируются пульсации переносимой с потоком скалярной величины.

Для проведения исследований была использована кондуктометрическая измерительная система: пространственные кондуктометрические датчики сетчатой конструкции [1] и измерительный комплекс ЛАД-36 [2]. В качестве примеси использовалась незначительная концентрация раствора соли (NaCl или Na₂SO₄). В качестве разрешающей способности кондуктометрических датчиков использовались минимальный линейный масштаб турбулентности, регистрируемый датчиком. Исследования проводились в экспериментальной модели (рис.1), представляющей собой канал квадратного сечения 50х50 мм, в котором происходит смешение спутных потоков с различными удельными проводимостями, создаваемыми примесью.



Рис. 1. Экспериментальная модель

В работе представлены результаты серии экспериментов, изложен порядок проведения исследований на лабораторном стенде, проведена обработка сигналов пространственных датчиков, а также изложена методика оценки макро и микромасштабов турбулентных структур в потоке. Полученные оценки пространственных и временных масштабов согласуются по порядку со значениями, рассчитанными теоретически [3] (табл. 1).

Число Рейнольдса, $Re \cdot 10^{-3}$	Характерная частота основных энергонесущих вихрей f_E , Гц	Оценка характерной частоты по критерию Струхала $Sh \approx 0,2$, Гц
19,0	0,55	0,88
24,4	1,02	1,04
28,4	1,03	1,20

Таб.1. Теоретические и экспериментальные значения частот основных энергонесущих вихрей

Результаты работы могут быть в дальнейшем использованы для оценки разрешающей способности чувствительных элементов измерительных систем, использующих трассерные методы измерений - минимальный линейный размер вихрей, регистрируемых датчиков.

Литература

1. Prasser, H.M. A new electrode-mesh tomograph for gas-liquid flows/H.M.Prasser, A. Bottger, J. Zschau // Flow Meas. Instrum. – 1998. – No. 9. – P. 111-119
2. Баринов, А.А. Особенности применения пространственных кондуктометрических датчиков при моделировании смешения потоков теплоносителя в элементах оборудования ядерных энергетических установок / А.А. Баринов [и др.] // Приборы и методы измерений. – 2016. – Т. 7. – №3
3. Снегирёв А.Ю. Высокопроизводительные вычисления в технической физике. Численное моделирование турбулентных течений: Учебное пособие. - СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. - 143 с

Секция проблем квантовой физики, электрофизики, квантовой радиофизики и проблем физики и астрофизики

Председатель: В.С. Лебедев (д.ф.-м.н., профессор)

Зам. председателя: С.Ю. Савинов (д.ф.-м.н.)

Секретарь: К.С. Кислов

Дата: 26.11.2020 Время: 11:00

УДК 533.361

Влияние температуры и длительности импульса накачки на параметры генерации в комбинационно-активных порошковых средах.

А.Н. Маресев^{1,2}, А.А. Нарич^{1,2}, М.А. Шевченко¹, С.Ф. Уманская¹, Н.В. Чернега¹

¹ Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Случайная лазерная генерация с момента первой работы Летохова [1] экспериментально была продемонстрирована в различных структурах, включая полупроводники [2] и материалы на основе редкоземельных элементов в порошковой форме [3], гибридные нанокompозиты [4], органические красители [5,6], жидкие кристаллы [7] и биологические ткани [8]. Было выполнено множество исследовательских работ по приготовлению и описанию неупорядоченных усиливающих сред на основе рассеивающих частиц, этих распределенных в твердотельной органической матрице. Одним из направлений активно развивающимся в настоящее время являются исследования случайного комбинационного (Рамановского) лазера [9]. Случайный рамановский лазер представляет собой порошок комбинационно активной среды с диаметром частиц от сотен нанометров до нескольких микрон. Эти частицы играют роль как среды усиления комбинационного рассеяния, так и центров рассеяния. Накачка такой системы осуществляется лазерным источником. Комбинационно- активная среда выбирается с учетом низкого поглощения, как линейного, так и нелинейного, и высокого поперечного сечения рассеяния во всем видимом спектре. Целью нашей работы было исследование влияния длительности импульса накачки и температуры комбинационно-активной среды на энергетические, спектральные и временные характеристики излучения случайного комбинационного лазера на основе порошка нитрата бария ($\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$). Данные кристаллы прозрачны в диапазоне 0,35 - 1,8 мкм. Комбинационный сдвиг составляет величину 1048 см^{-1} , коэффициент усиления $g = 47 \pm 5 \text{ см} / \text{ГВт}$. В качестве накачки использовалось излучение второй гармоники Nd:YAG лазеров с длительностью импульса 20 нс и 30 пс, с максимальной энергией в импульсе 0,1 Дж и 0,05 Дж. Использовалась экспериментальная установка, приведенная на Рис.1

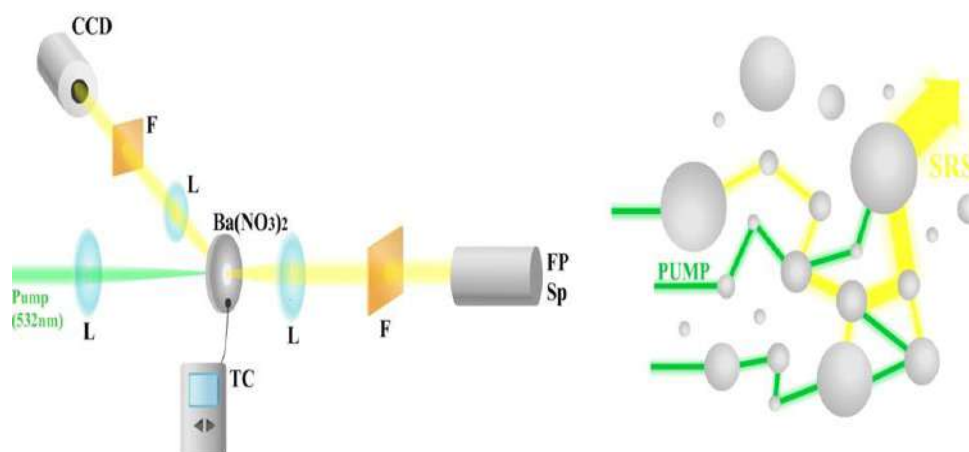


Рис.1. L-линзы, F – фильтры, TC – система контроля температуры, FP,SP -спектральная аппаратура, CCD- камера для контроля пространственного распределения рассеянного излучения.

В процессе эксперимента измерялись: спектр рассеянного излучения (включая его тонкую структуру), пространственное распределение первой и второй стоксовых компонент рассеянного излучения, энергетический порог возбуждения первой и второй стоксовых компонент. Все измерения проводились для различных температур активной среды, от температуры жидкого азота до комнатной. Было обнаружено пятикратное понижение порога возбуждения первой стоксовой компоненты ВКР при пикосекундной накачке в исследуемой системе при понижении температуры от комнатной до температуры жидкого азота. Показано, что температурная зависимость эффективностей преобразования первой, второй стоксовых и антистоксовой компонент существенно отличаются (Рис.2).

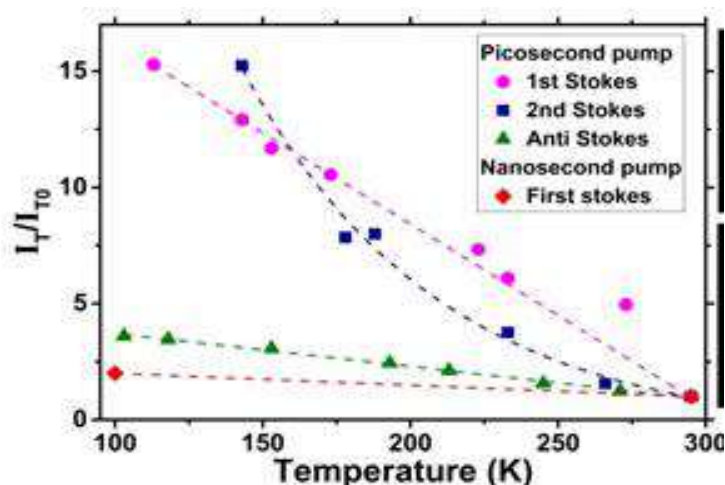


Рис. 2. Температурная зависимость эффективностей преобразования компонент ВКР при пико и наносекундной накачке.

В работе показана возможность эффективного управления параметрами ВКР генерации в неупорядоченной среде путем варьирования её температуры в диапазоне от комнатной до температуры жидкого азота.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 19-79-30086).

Литература

1. Letokhov, V. S. Generation of light by a scattering medium with negative resonance absorption. Sov. Phys. JETP 26, 835–840 (1968).
2. H. Cao, Y. Zhao, S. T. Ho, E. W. Seelig, Q. H. Wang and R. P. H. Chang, “Random Laser Action in Semiconductor Powder,” Physical Review Letters, Vol. 82, No. 11, 1999, pp. 2278-2281. doi:10.1103/PhysRevLett.82.2278
3. G. Williams, S. C. Rand, T. Hinklin and R. M. Laine, “Blue and Infrared Laser Action in Strongly Scattering Nd: Alumina Nanopowders,” Conference on Lasers and Electro-Optics, OSA Technical Digest, Optical Society of America, Washington DC, 1999.

4. D. Anglos, A. Stassinopoulos, R. N. Das, G. Zacharakis, M. Psyllaki, R. Jakubiak, R. A. Vaia, E. P. Giannelis and S. H. Anastasiadis, "Random Laser Action in Organic- Inorganic Nanocomposites," Journal of the Optical Society of America B, Vol. 21, 2004, pp. 208-213. doi:10.1364/JOSAB.21.000208
5. M. A. Noginov, N. E. Noginova, H. J. Caulfield, P. Venkateswarl and M. Mahdi, "Line Narrowing in the Dye Solution with Scattering Centers," Optics Communica-tions, Vol. 118, No. 3-4, 1995, pp. 430-437. doi:10.1016/0030-4018(95)00177-A
6. E. Enciso, A. Costela, I. Garcia-Moreno, V. Martin and R. Sastre, "Conventional Unidirectional Laser Action Enhanced by Dye Confined in Nanoparticle Scatters," Lang- muir, Vol. 26, No. 9, 2010, pp. 6154-6157. doi:10.1021/la100813r
7. S. M. Morris, A. D. Ford, M. N. Pivnenko and H. J. Coles, "Efficient Random Laser Effect in a New Dye-Nematic Liquid Crystalline Composite," Romanian Reports in Physics, Vol. 62, No. 3, 2010, pp. 444-454
8. R. C. Polson and Z. V. Vardeny, "Random Lasing in Hu- man Tissues," Applied Physics Letters, Vol. 85, 2004, p. 1289. doi:10.1063/1.1782259
9. Brett H. Hokr, Joel N. Bixler, Michael T. Cone, John D. Mason, Hope T. Beier, Gary D. Noojin, Georgi I. Petrov, Leonid A. Golovan, Robert J. Thomas, Benjamin A. Rockwell & Vladislav V. Yakovlev "Bright emission from a random Raman laser" DOI: 10.1038/ncomms5356 Nature Communications volume 5, Article number: 4356 (2014)

УДК 539.129

Генерация легкой темной материи за счет процесса Дрелла-Яна и ее взаимодействие с эмульсионным детектором в эксперименте SHiP (Search for Hidden Particles)

Э.Д. Урсов¹, А.М. Анохина^{1,2}

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

²НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына

В настоящее время для объяснения некоторых астрофизических и космологических эффектов используется так называемая темная материя — вещество, заполняющее Вселенную, невидимое в электромагнитном и нейтринном излучении, но проявляющее себя гравитационно.

Сечение негравитационного взаимодействия частиц темной материи с обычным веществом очень мало, поэтому их называют WIMPs (Weakly Interacted Massive Particles). В данной работе рассматриваются WIMPs с массой порядка 1 ГэВ/c² (Light Dark Matter – LDM). Модели, описывающие LDM, требуют существование частицы-медиатора (темного фотона), с помощью которого LDM взаимодействует с барионным веществом.

Существует большое количество экспериментов, целью которых является обнаружение темной материи через ее негравитационное взаимодействие с обычным веществом. Особый интерес для изучения LDM представляют ускорительные нейтринные эксперименты с фиксированной мишенью, имеющие высокую светимость (MiniBooNE и T2K). Одной из задач будущего эксперимента SHiP [1] в CERN с энергией налетающего пучка протонов 400 ГэВ является именно детектирование LDM. Основной задачей работы было выделение событий LDM на фоне нейтринных событий.

В работе проведено полное моделирование процессов рождения и детектирования двух видов LDM: дираковского фермиона и скаляра, и моделирование нейтринных фоновых событий с помощью комплекса GENIE-MC [2]. При моделировании использовалась модифицированная версия Монте-Карло симулятора BdNMC [3], комплексы PYTHIA [4]. Моделирование можно разделить на несколько этапов, как показано на рис.1:

- 1) Столкновение пучка протонов с энергией 400 ГэВ с протоном или нейтроном вещества мишени (вольфрама) и рождение медиатора V в процессе Дрелл-Яна;
- 2) Распад медиатора V на две частицы LDM;
- 3) Глубоко неупругое рассеяние попавшей в эмульсионный детектор LDM на ядре свинца;
- 4) Рождение вторичных частиц в результате рассеяния;

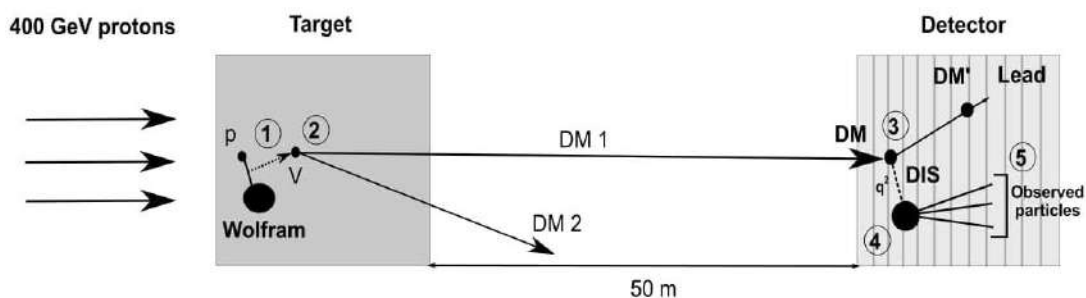


Рис.8. Этапы моделирования эксперимента по поиску LDM в SHiP.

В результате получены кинематические характеристики рождающихся LDM, проведен анализ глубоко неупругого взаимодействия LDM с ядрами свинца в эмульсионном детекторе эксперимента, в частности проведен анализ рождающихся вторичных частиц (рис. 2).

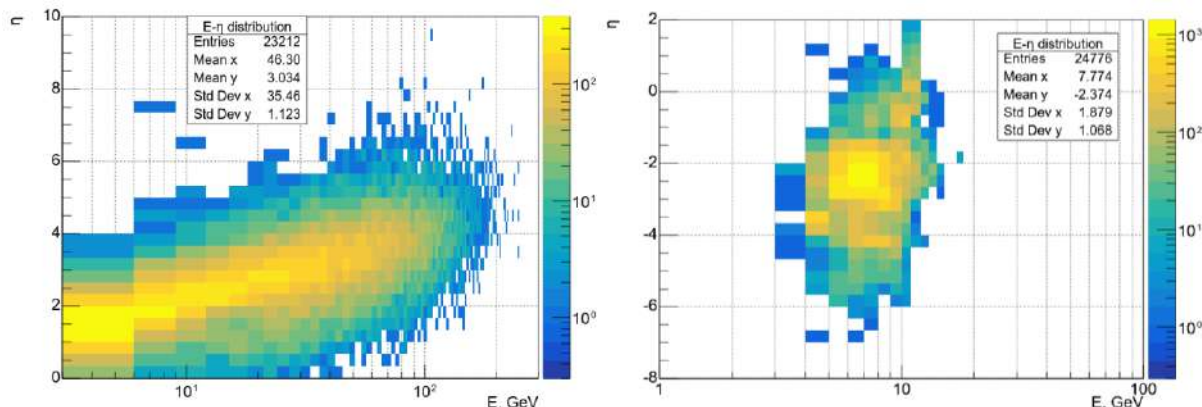


Рис.9. Распределение по псевдобыстротам и энергиям событий. Слева — нейтринные события, справа — события LDM

Установлено, что сечение рождения темного фотона уменьшается в зависимости от выбора его массы. Также с помощью методов машинного обучения, на основе результатов моделирования, был разработан классификатор событий, который с большой точностью способен отбирать события LDM на фоне нейтринных событий.

Литература

1. Soper, D.E. et al. Scattering of dark particles with light mediators // Phys. Rev. D. 2014. V. 90. P. 1–23.
2. SHiP Collaboration. A facility to Search for Hidden Particles (SHiP) at the CERN SPS. 2015.
3. DeNiverville P. et al. Light Dark Matter in Neutrino Beams: Production Modeling and Scattering Signatures at MiniBooNE, T2K, and SHiP // Physical Review D. 2017. V. 95. P. 1–38.
4. Andreopoulos C. et al. The GENIE Neutrino Monte Carlo Generator: Physics and User Manual. 2015.
5. Sjöstrand, T. PYTHIA 6.4 physics and manual // J. High Energy Phys. 2006. V. 2006. P. 26.

УДК 535.3

Исследование структурных свойств радиационно-стойких многослойных структур $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2$ и $\text{ZrO}_2/\text{SiO}_2$ методом рентгеновской рефлектометрии

О.С. Шляхтун¹, А.С. Скрыбин², С.С. Гижжа³

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана
(национальный исследовательский университет)

³Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук

Развитие [1] сильноточной электроники, лазерных и плазменных установок требует поиска и разработки новых материалов и технологий производства. В настоящее время тонкие многослойные керамические покрытия [2] используются в оптических элементах установок с высокой плотностью энергии из-за высокой радиационной стойкости. Прогресс в разработке новых плазменных

ускорителей и источников плазмы для ВУФ-литографии [3] также заставляет проводить подобные исследования.

В работе многослойные структуры $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2$ и $\text{ZrO}_2/\text{SiO}_2$ рассматривались как покрытия для прототипов. Эти системы перспективны для приложений, требующих высокой стабильности отражательной способности или пропускания при внешних факторах, таких как потоки высокоскоростной плазмы, излучение высокой яркости, обломки и т. д.

Образцы перспективных отражающих и просветляющих покрытий на основе многослойных и бинарных структур $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2$ и $\text{ZrO}_2/\text{SiO}_2$ были получены методом электронно-лучевого напыления. Плотность, шероховатость и параметры границы раздела были охарактеризованы с помощью рентгеновского рефлектометра CompeFlex 5 с использованием излучения $\text{Cu K}\alpha$ [4].

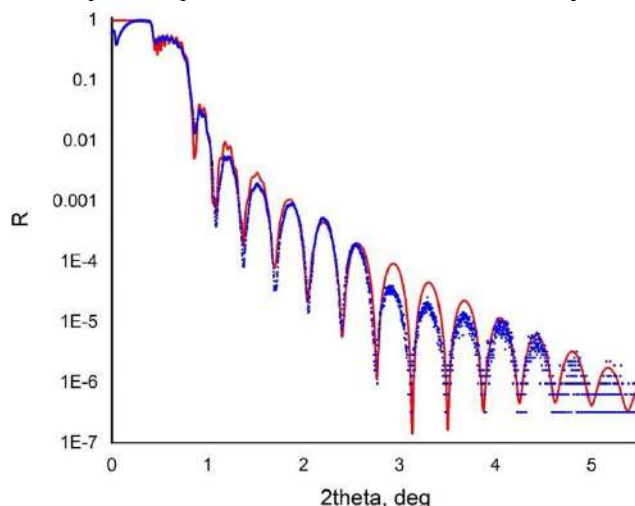


Рис. 3 Кривая рентгеновской отражательной способности бислоя $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2$ (2 слоя с общей толщиной 0,14 мкм): экспериментальные данные (синий) и смоделированная (красный)

Метод рентгеновской рефлектометрии позволил уточнить некоторые особенности внутренней структуры покрытий. На рис. 1 представлена кривая рентгеновской отражательной способности бислоя $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2$. Было продемонстрировано, что покрытие образовано слоем SiO_2 с плотностью 2,15 г/см³ и толщиной 121 нм и HfO_2 - слой плотностью 8,88 г/см³ и толщиной 21 нм. Показано, что шероховатость верхнего слоя составляет 2,1 нм. Структура Hf/Si была идентифицирована. Плотность границы раздела Hf/Si толщиной 2,3 нм составила 5,7 г/см³. Структурные параметры границы раздела необходимы для оценки радиационно-стимулированной диффузии и других модификаций специальных покрытий при воздействии высокоинтенсивного излучения.

Использованная методика их характеристики применима для исследования изменения параметров пленок при высокоэнергетичных воздействиях, таких как потоки плазмы, излучение высокой интенсивности.

Литература

1. Attwood D., "Soft X-Rays and Extreme Ultraviolet Radiation," - New York: Cambridge University Press, 1999.
2. Babayants G.I., Zhupanov V.G., Klyuev E.V., Garanin S.G., Savkin A.V., Sukharev S.A., Sharov O.A. - IEEE J. Quantum Electron. 35, 663–666 (2005).
3. Protasov Yu.S., Protasov Yu.Yu., Instrum. Exp. Tech+. 46, 72–77 (2003).
4. Popov N.L., Uspenskiy Yu.A., Turyanskiy A.G., Pirshin I.V., Vinogradov A.V., Platonov Yu.Ya. - Semiconductors. 37, 675–680 (2003).

УДК 621.373.826

Модовый состав излучения пикосекундного Nd:YAG лазера с абберационной термолинзой при продольной диодной накачке

А.М. Смирнов

Международный лазерный центр МГУ имени М.В. Ломоносова
Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В данной работе анализируются особенности модового состава и условия устойчивой генерации в пикосекундных Nd:YAG лазерах с продольной диодной накачкой. Источники лазерных импульсов высокой средней и пиковой мощности пикосекундной длительности используются в большом количестве приложений, таких как спектроскопия, накачка параметрических усилителей, абляция, лазерная локация удаленных объектов (искусственные спутники, Луна), лазерная медицина, косметология и т.д. [1]. Относительно простая реализация продольной диодной накачки позволяет в некоторых пределах мощности накачки получить высокую эффективность вложения энергии и высокое качество пучка благодаря оптимальному перекрытию низшей моды резонатора с областью накачки. В то же время продольная накачка приводит к неоднородному распределению температуры в лазерном кристалле, что приводит к формированию абберационной термолинзы. Абберационная термолинза в резонаторе или в усилителе приводит к растущим потерям и ухудшению качества пучка при увеличении мощности накачки. Абберационная составляющая тепловой линзы не может быть устранена сферической оптикой, поэтому необходимо восстановить форму термолинзы для дальнейшей компенсации ее воздействия.

Для восстановления профиля тепловой линзы были проведены предварительные измерения профилей пробного пучка He-Ne лазера, прошедшего через Nd:YAG с продольной диодной накачкой. Модовый состав излучения до и после термолинзы представлялся в виде суперпозиции вложенных лаггер-гауссовых пучков [2]. Проведено моделирование распространения пробного пучка для восстановления измеренных профилей по расчетным при изменении формы абберационной термолинзы.

Литература

1. Mikheev N.G., Morozov V.B., Olenin A.N., Tunkin V.G., Yakovlev D.V. Picosecond Pulsed High-Peak-Power Lasers. K. Yamanouchi et al. (eds.), *Progress in Photon Science*, Springer Series in Chemical Physics 119, Chapter 4, 2019, 24 с.
2. Е.Г. Абрамочкин, В.Г. Волостников, Современная оптика гауссовых пучков. ФИЗМАТЛИТ, 2010, 110 с.

УДК 535.8

Оптическая ловушка для получения рекордно большого квантово-вырожденного атомного газа

В.А. Виноградов, К.А. Карпов

Институт прикладной физики РАН

Квантовые газы представляют интерес из-за возможности наблюдения новых фазовых состояний, ранее предсказанных теоретически. Так, например, в 1995 году была экспериментально получена конденсация Бозе-Эйнштейна [1], в 2001 году это достижение было отмечено Нобелевской премией. В нобелевском эксперименте конденсат состоял из 10^5 частиц, в настоящее время создают конденсаты из 10^8 бозонов [2]. Что касается вырожденных ферми-газов, максимальное полученное число атомов в них меньше, чем в бозе-конденсатах, и составляет порядка 10^7 [3]. Столь малое по сравнению с задачами сверхпроводимости и сверхтекучести число частиц мешает наблюдению таких явлений как неоднородная сверхтекучесть Фульде-Феррелла-Ларкина-Овчинникова [4, 5] и спаривание в р-канале по механизму Кона-Латтинжера [6]. Увеличение числа атомов выгодно и с точки зрения метрологии, поскольку дробовой шум убывает как $N^{-1/2}$. Полая оптическая ловушка для лития-6, представленная в данной работе, позволит перехватить все (порядка 10^{10}) атомы после предварительного охлаждения в магнито-оптической ловушке, и в дальнейшем получить рекордно большой объём квантово-вырожденного атомного газа.

Рассмотрим принцип работы дипольной ловушки. Атом при попадании в переменное электромагнитное поле лазерного пучка оказывается в потенциале [7]:

$$U(\vec{r}) = \frac{3\pi^2\Gamma}{2\omega_0^3(\omega - \omega_0)} I(\vec{r})$$

где Γ – обратное время жизни возбужденного состояния, ω – частота лазерного

излучения, ω_0 – резонансная частота ближайшего перехода в спектре атома. Знак потенциала зависит от частотной отстройки лазера от резонанса. Нас интересует случай, когда $\omega - \omega_0 > 0$, тогда атом выталкивается из области сильного поля, т.е. при достаточно большом градиенте интенсивности он «отскакивает» от сфокусированного лазерного пучка, как от стенки. Если ограничить такими стенками облако атомов по всем координатам, возможно его удержание.

Для большой высоты потенциала отстройка от резонанса должна быть мала, однако с уменьшением отстройки растёт частота рэлеевского рассеяния. Если внутри ловушки есть локальные максимумы интенсивности, которые могут возникать из-за aberrаций или дифракции, атомы, попадая в область ненулевого поля, будут нагреваться и улетать из ловушки.

Схематично представленная на рис. 1 ловушка имеет форму полой трубки. Такую ловушку создавать удобнее, чем кубическую, так как для неё нужно меньше лазерных пучков. В схеме для создания кольцевого пучка присутствуют три элемента: закреплённый в держателе выход световода, аксикон (коническая линза) и собирающая линза. Было решено ограничиться минимальным числом оптических элементов, т.к. каждая дополнительная оптическая поверхность может привести к появлению спеклов, а каждая линза вносит aberrации, увеличивая толщину стенок и создавая локальные максимумы.

На рис. 2 представлен профиль поглощения атомами ^6Li импульса подсветки. Поскольку газ в дипольной ловушке не излучает фотоны, было реализовано фотографирование в резонансном свете – лазерный импульс, находящийся в резонансе с атомами, попадает на матрицу камеры, предварительно пройдя через область ловушки и частично поглощаясь атомами лития. Снимок был сделан спустя 1 мс после отключения магнито-оптической ловушки, наличие на нём у облака чётких границ, соответствующих лазерным пучкам, свидетельствует о факте захвата.

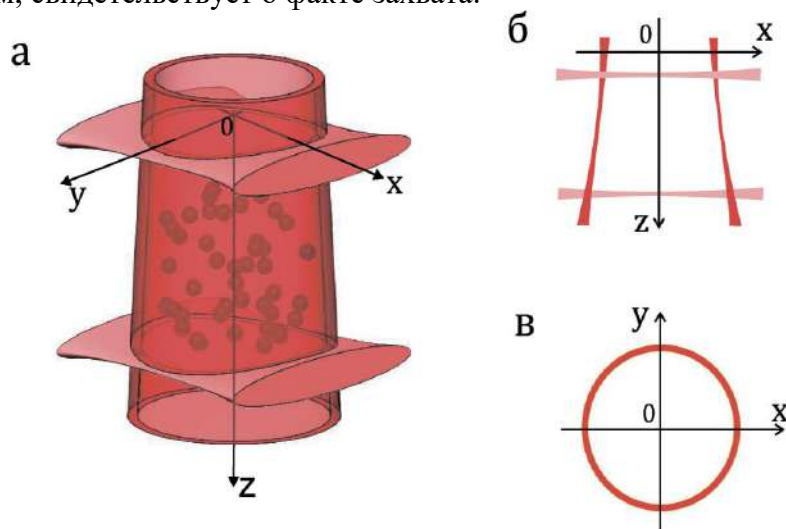


Рис.1. а) Захваченные атомы (обозначены сферами) в оптической дипольной ловушке (обозначена красным цветом); б,в) Сечения ловушки в плоскостях xz и xy соответственно.

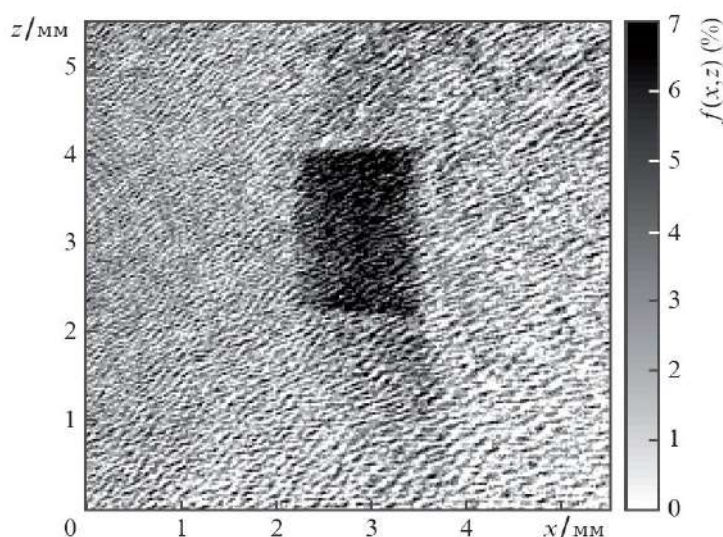


Рис. 2. Снимок атомов ${}^6\text{Li}$ в ловушке в плоскости xz . $f(x,z)$ – доля поглощённого облаком атомов света (в процентах). Данные взяты из работы [8].

Литература

1. Anderson M.H., Ensher J.R., Matthews M.R., Wieman C.E., Cornell E.A. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor // Science. 1995. V. 269. P. 198.
2. Van der Stam K.M.R., van Ooijen E.D., Meppelink R., Vogels J.M., van der Straten P. Large atom number Bose-Einstein condensate of sodium // Rev. Sci. Instrum. 2007. V. 78. P. 013102.
3. Zwerlein M.W., Schunck C.H., Schirotzek A., Ketterle W. Direct observation of the superfluid phase transition in ultracold Fermi gases // Nature. 2006. V. 442. P. 54.
4. Fulde P., Ferrell R.A. Superconductivity in a Strong Spin-Exchange Field // Phys. Rev. 1964. V. 135. P. A550.
5. Larkin A.I., Ovchinnikov Yu.N. Nonuniform state of superconductors // Sov. Phys. JETP. 1965. V. 20. P. 762.
6. Kohn W., Luttinger J.M. New Mechanism for Superconductivity // Phys. Rev. Lett. 1965. V. 15. P. 524.
7. Grimm R., Weidemüller M., Ovchinnikov Y.B. Optical Dipole Traps for Neutral Atoms // Adv. At. Mol. Opt. Phys. 2000. V. 42. P. 95.
8. Vinogradov V.A., Karpov K.A., Lukashov S.S., Turlapov A.V. Trapping of lithium atoms in a large hollow optical dipole trap // Quantum Electron. 2020. V. 50. P. 520.

УДК 520.343

Прототип детектора большого объема в Баксанской нейтринной обсерватории ИЯИ РАН

А.Д. Луканов

Институт ядерных исследований РАН

Данная статья описывает текущее состояние первого этапа проекта, а именно прототип детектора с массой сцинтиллятора 0.5 тонн.

Прототип детектора геонейтрино состоит из двух зон. Центральная зона заполнена сверхчистым жидким сцинтиллятором, и окружена второй зоной, заполненной водой. Объем сферы, в которой находится сцинтиллятор, составляет 492.8 м^3 . В качестве рабочего объема был выбран линейный алкилбензол (ЛАБ). Сфера выполнена из акрила, прозрачного материала с показателем преломления близкому к ЛАБ.

Вся установка расположена в цилиндрическом резервуаре из полипропилена, заполненным водой. Сфера окружена двадцатью 10-дюймовыми фотоумножителями Hamamatsu R7081-100. ФЭУ размещаются в вершинах правильного додекаэдра на расстоянии около 75 см от центра сферы.



Рис. 10. Каркас с установленными на нем ФЭУ и сферой. На заднем фоне резервуар с водой, в который помещается каркас

Была проведена сборка прототипа детектора геонейтрино и настройка всех его систем. Следующим шагом будет установка концентраторов света для ФЭУ, развитие алгоритмов и ПО для обработки сигналов и улучшение существующих элементов.

Литература

1. Sinev V V et al 2017 Phys. Atom. Nuclei 80 446–54
2. Malyshkin Yu M et al 2020 Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A 951 162920
3. Ma K J et al 2011 Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A 629 93–100

УДК 533.92, 539.184.5

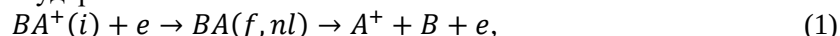
Расчет констант скоростей диссоциативного возбуждения молекулярных ионов инертных газов электронным ударом

К.С. Кислов, С.С. Моритака, А.В. Мекиун, А.Н. Маресев, А.Д. Кондорский, А.А. Нариз, В.С. Лебедев

Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Процессы образования и распада молекулярных ионов играют существенную роль в целом ряде задач кинетики низкотемпературной плазмы [1,2] и физики звездных и планетных атмосфер [3,4], а также при разработке мощных газовых лазеров [5] и источников ВУФ-излучения [6]. Среди указанных процессов значительный интерес представляет процесс диссоциативного возбуждения молекулярных ионов электронным ударом



происходящий в результате резонансного неадиабатического обмена энергии внешнего электрона и внутренних электронов молекулярного иона BA^+ . Данная работа посвящена теоретическому анализу этого процесса в квазиравновесной плазме смесей инертных газов.

Для теоретического исследования диссоциативного возбуждения молекулярных ионов была разработана оригинальная теоретическая модель, в рамках которой этот процесс описывается как результат резонансного неадиабатического перехода между электронными термами $U_i(R)$ и $U_f(R)$ молекулярного иона BA^+ . В основе данной модели лежит использование квазиклассического приближения для матричных элементов оператора взаимодействия, а также приближения квазинепрерывного спектра колебательно-вращательных состояний молекулярного иона. Особенность разви-

того теоретического подхода состоит в том, что он позволяет учесть интегральный вклад всего квазиконтинуума vJ -состояний в динамику процесса (1). С использованием этого подхода были получены относительно простые полуаналитические выражения для сечений $\sigma^{\text{de}}(\epsilon, T)$ [см²] диссоциативного возбуждения ионов BA^+ электронным ударом при газовой температуре T и начальной энергии электрона ϵ . Далее была получена формула для константы скорости $\alpha^{\text{de}}(T_e, T) = \langle v_e \sigma^{\text{de}}(\epsilon, T) \rangle_{T_e}$ [см³/с] процесса (1) при газовой T и электронной температуре T_e путем усреднения по распределению Максвелла для скоростей свободных электронов v_e .

Конкретные расчеты сечений и констант скоростей диссоциативного возбуждения были проведены для гетероядерных (HeXe^+ , NeXe^+ , ArXe^+ и KrXe^+) и гомоядерных ионов (Ar_2^+ , Xe_2^+) инертных газов в широком диапазоне газовых и электронных температур: $T \sim 100 \div 2000$ К, $T_e \sim 100 \div 70000$ К. Подобный выбор молекулярных ионов позволил провести исследования для систем с сильно различающимися энергиями диссоциации $D_0 \sim 0.01 - 1$ эВ.

Одна из главных задач работы состояла в исследовании зависимости сечений $\sigma^{\text{de}}(\epsilon, T)$ от энергии электронов ϵ и констант скорости $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ от температуры T_e при различных значениях T . Установлено, что характер исследованных зависимостей в значительной степени определяется величиной энергии диссоциации ионов D_0 . Показано, что в случае сильносвязанных молекулярных ионов с $D_0 \gtrsim 0.1$ эВ (ArXe^+ , KrXe^+ , Ar_2^+ , Xe_2^+) процесс диссоциативного возбуждения имеет явно выраженный пороговый характер, который проявляется тем ярче, чем ниже температура газа T . В этих случаях графики величин $\sigma^{\text{de}}(\epsilon, T)$ и $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ при фиксированных T имеют острые максимумы (показано на рис. 1 на примере ионов ArXe^+ и KrXe^+). Положение максимумов может быть оценено из условия, что неадиабатические переходы между термами, сопровождающиеся распадом ионов BA^+ , происходят на межъядерных расстояниях R_e , близких к положению равновесия нижнего терма $U_i(R)$. В случае же слабосвязанных ионов с $D_0 \lesssim 0.1$ эВ (HeXe^+ , NeXe^+) пороговый характер диссоциативного возбуждения не наблюдается.

В рамках работы было проведено сравнение результатов расчетов сечений и констант скоростей процесса (1) с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными. Продemonстрировано хорошее количественное и качественное совпадение результатов.

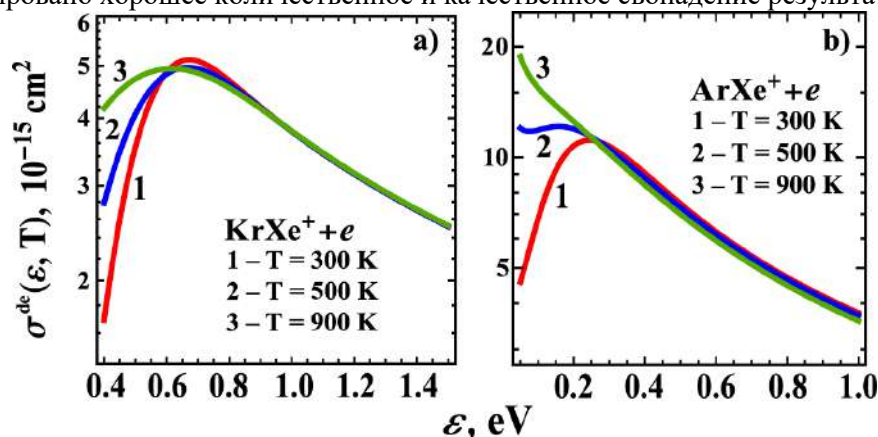


Рис.1. Сечения $\sigma^{\text{de}}(\epsilon, T)$ диссоциативного возбуждения молекулярных ионов KrXe^+ (a) и ArXe^+ (b) электронным ударом (сплошные кривые) при различных газовых температурах T .

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 19-79-30086).

Литература

1. Piel A. Plasma Physics. 2nd edition – Springer International Publishing AG, 2017. 463 p.
2. Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. – М.: Наука, 1982, 378 с.
3. Capitelli M., Fereirra C.M., Gordiets B.M., Osipov A.I. Plasma Kinetics in Atmospheric Gases – Berlin, Heidelberg: Springer, 2000. 300 p.
4. Smirnov B.M. Microphysics of Atmospheric Phenomena – Springer International Publishing, 2017. 270 p.
5. Emmons D.J., Weeks D.E. Kinetics of high pressure argon-helium pulsed gas discharge // J. App. Phys. 2017. V. 121. No. 20. P. 203301.
6. Cooley J.E., Urdahl R., Xue J., Denning M., Tian P. and Kushner M.J. Properties of microplasmas excited by microwaves for VUV photon sources // PSST 2015. V. 24. No. 6. P. 065009.

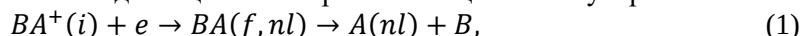
Сравнительный анализ эффективностей резонансных механизмов диссоциативного возбуждения и диссоциативной рекомбинации молекулярных ионов инертных газов

К.С. Кислов, С.С. Моритака, А.В. Мекиун, А.Н. Маресев, А.Д. Кондорский, А.А. Нарци, В.С. Лебедев

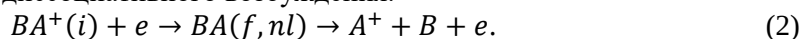
Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Представленная работа посвящена теоретическому исследованию резонансных процессов разрушения молекулярных ионов инертных газов в результате столкновения со свободными электронами. К указанным процессам относится диссоциативная рекомбинация молекулярных ионов



а также близкий ей процесс диссоциативного возбуждения:



Оба процесса (1) и (2) протекают в результате резонансного неадиабатического обмена энергии налетающего электрона и молекулярного иона BA^+ . Исследования этих процессов представляют интерес для целого ряда задач физики звездных и планетных атмосфер [1,2], физики ранней вселенной [3], кинетики низкотемпературной плазмы [4,5], а также при разработке мощных газовых лазеров [6].

Прямой сравнительный анализ механизмов (1) и (2) проводился путем расчета констант скорости $\alpha^{de}(T_e, T)$ [см³/с] диссоциативного возбуждения (2) и α_{Ry}^{dr} [см³/с] диссоциативной рекомбинации (1) на все ридберговские уровни nl атомов инертных газов. Указанные константы скорости рассчитывались с помощью разработанного нами теоретического подхода, в рамках которого оба процесса (1) и (2) рассматриваются единым образом как результат резонансного неадиабатического перехода между электронными термами $U_i(R)$ и $U_f(R)$ молекулярного иона BA^+ . Ключевая особенность этого подхода состоит в том, что он позволяет учесть интегральный вклад всего квазиконтинуума вращательных состояний молекулярного иона BA^+ в динамику исследуемых процессов распада.

Конкретные теоретические расчеты констант скоростей процессов (1) и (2) были проведены для гомоядерных Ar_2^+ , He_2^+ , и гетероядерных ионов инертных газов $NeXe^+$, $ArXe^+$ и $KrXe^+$ в условиях, типичных для лабораторной низкотемпературной плазмы. Подобный выбор систем связан, в частности, с распространенностью их использования при реализации лазеров с оптической накачкой на инертных газах. Была рассмотрена двухтемпературная плазма, в которой газовая температура, в зависимости от рассматриваемых условий, варьировалась в диапазоне $T \sim 100 \div 2000$ К, а электронная температура изменялась в диапазоне $T_e \sim 300 \div 70000$ К.

Одна из ключевых задач работы состояла в установлении параметров плазмы, при которых слабоизученный процесс (2) диссоциативного возбуждения вносит определяющий вклад в динамику распада молекулярных ионов инертных газов. Из полученных в работе результатов следует, что роль механизма диссоциативного возбуждения значительно усиливается по мере роста температуры электронов T_e и уменьшения энергии диссоциации D_0 молекулярных ионов BA^+ . Данная картина продемонстрирована на рис. 1 на примере молекулярного иона He_2^+ при температурах $T \sim 300 - 2000$ К и $T_e \sim 1500 - 70000$ К. Как видно из рисунка, в случае сильносвязанных ионов с $D_0 \sim 1$ эВ (Ar_2^+ , He_2^+) при температурах $T_e \lesssim 7000$ К определяющий вклад в разрушение ионов вносит механизм диссоциативной рекомбинации (1). Однако, по мере увеличения T_e усиливается роль механизма диссоциативного возбуждения (2), и он становится доминирующим при $T_e \gtrsim 10000$ К. Из результатов работы также следует, что в случае слабосвязанных ионов с $D_0 < 100$ мэВ ($NeXe^+$ и $NeXe^+$) процесс (2) доминирует над каналом диссоциативной рекомбинации (1) даже при очень низких значениях $T_e \sim 300$ К.

Еще одна важная задача работы состояла в исследовании процессов потери энергии электронов за счет механизмов (1) и (2) в плазме смесей Kr/Xe, Ar/Xe и Ne/Xe. Анализ проводился путем расчета дифференциальных сечений и констант скоростей процессов (1) и (2) в единичный интервал конечной энергии электрона в непрерывном или квазинепрерывном спектре. Из полученных результатов следует, что в случае слабосвязанных ионов резонансные столкновительные процессы имеют квазиупругий характер, а начальные и конечные энергии

электронов близки к нулю. При этом доминирующим столкновительным процессом является ранее мало изученный процесс диссоциативного возбуждения молекулярных ионов инертных газов.

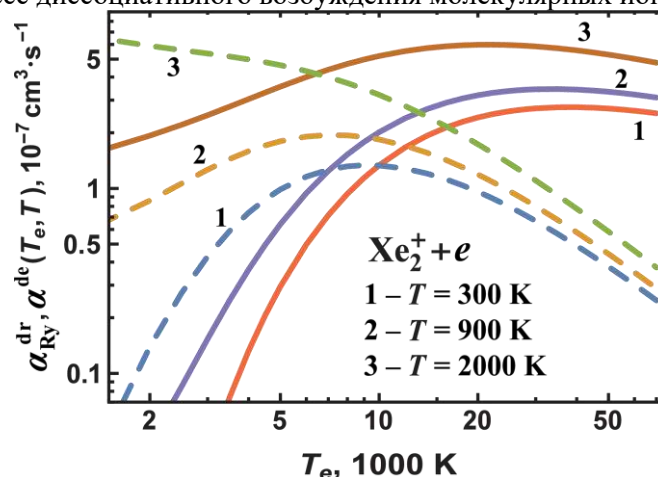


Рис. 1. Константы скорости диссоциативной рекомбинации на ридберговские уровни $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$ (пунктирные кривые) и диссоциативного возбуждения молекулярных ионов Xe_2^+ электронным ударом $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ (сплошные кривые) при различных T

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 19-79-30086).

Литература

1. Srećković, V.A., Mihajlov, A.A., Ignjatović, L.M., & Dimitrijević, M.S. Ion-atom radiative processes in the solar atmosphere: quiet Sun and sunspots // *Advances in Space Research*. 2014. V. 54. No. 7. P. 1264-1271.
2. Larsson M., Orel A.E. Dissociative Recombination of Molecular Ions – Cambridge: Cambridge University Press, 2008
3. Suazo, M., Prieto, J., Escala, A., Schleicher, D. R. The role of gas fragmentation during the formation of super-massive black holes // *The Astrophysical Journal*. 2019. V. 885. No. 2. P. 127.
4. Piel A. Plasma Physics. 2nd edition – Springer International Publishing AG, 2017. 463 p.
5. Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. – М.: Наука, 1982, 378 с.
6. Emmons, D.J., Weeks, D.E., Eshel, B., Perram, G.P. Metastable Ar (1s5) density dependence on pressure and argon-helium mixture in a high pressure radio frequency dielectric barrier discharge // *Journal of Applied Physics*. 2018. V. 123. No. 4. P. 043304.

УДК 535.231.15

Трехмерные полимерные оптические мосты: изучение морфологии

Д.Д. Меркушев^{1,2}, Р.П. Матитал¹, Р.Д. Звагельский^{1,2}, Д.А. Колымагин^{1,2}, А.Г. Витухновский^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский институт)

²Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук

В последние несколько десятилетий передача данных на основе использования кремниевой фотоники стремительно развивается и играет важную роль во многих областях промышленности, таких как оптическая связь, волоконно-оптические телекоммуникационные системы, компоненты микрофотоники. Однако, доступные методы интеграции элементов ввода/вывода между фотонными чипами имеют высокие потери излучения, могут зависеть от поляризации [1] и иметь высокие производственные затраты. Недавно проведенные исследования продемонстрировали существование новой технологии изготовления оптических мостов с малыми потерями при фотонном соединении, прозрачных для телекоммуникационной длины волны 1550 нм [2].

В данной работе мы изготовили оптические мосты (волноводы) методом прямой лазерной печати и изучили их морфологию [3]. Методика прямой лазерной печати основана на нелинейном процессе двухфотонной полимеризации специального материала - фоторезиста. Фемтосекундное лазерное излучение 780 нм фокусируется в фоторезисте, что приводит к двухфотонному поглощению и локальной полимеризации. Изучение морфологии оптических мостов производилось при

помощи конфокального микроскопа (рис.1а), сканирующего электронного микроскопа (рис1.б), атомно-силового микроскопа и оптического темнопольного микроскопа. Были рассмотрены и подобраны различные фоторезисты для прямого лазерного письма, непосредственно в которых и производилось изготовление мостов. Установлено, что излучение распространяется в волноводах, изготовленных рассмотренным методом.

Авторы выражают свою благодарность Центру коллективного пользования МФТИ за содействие в данной работе. Финансовая поддержка работы осуществлялась частично в рамках проектов РФФИ № 18-29-20129 (морфология и литография) и РФФИ № 18-02-00811 (спектральные исследования).

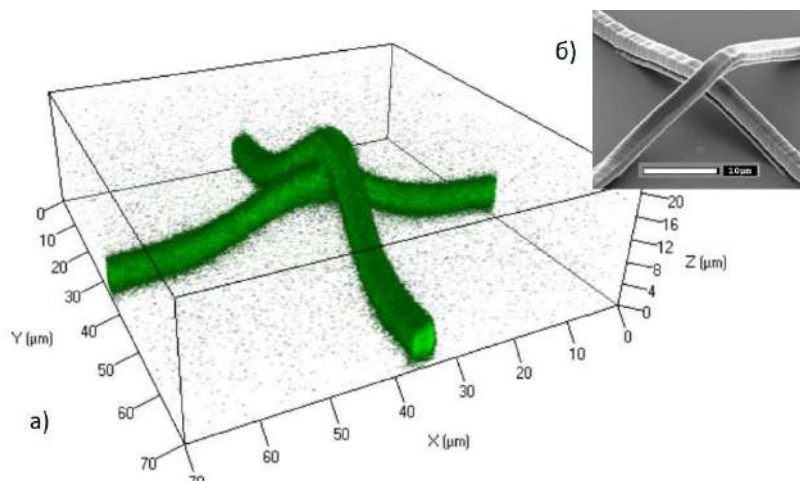


Рис. 1. (а) изображение оптических мостов, полученное при помощи конфокального микроскопа; (б) снимок тестовых оптических мостов при помощи растрового электронного микроскопа JEOL JSM-7001F.

Литература

1. Fukuda, H., Yamada K., Tsuchizawa T., Watanabe T., Shinojima T., Itabashi S. Silicon photonic circuit with polarization diversity // Opt. Express. 2008 V.16. I. 7. pp. 4872-4880.
2. Blaicer M., Billah M.R. Hybrid multi-chip assembly of optical communication engines by in situ 3D nano-lithography // Light: Science & Applications. 2020. Article number. 71.
3. Zvagelsky R., Chubich D., Kolymagin D., Korostylev E., Kovalyuk V., Prokhodtsov A., Tarasov A., Goltsman G., Vitukhnovsky A. Three-dimensional polymer wire bonds on chip: morphology and functionality // Journal of Physics D: Applied Physics. 2020. P. 1-8.

Секция современных проблем теоретической физики и физики конденсированного состояния

Председатель: М.В. Фейгельман (д.ф.-м.н., профессор)

Зам. председателя: О.В. Скрыбина (к.ф.-м.н.)

Секретарь: А.С. Осин

Дата: 27.11.2020 Время: 9:00

УДК 538.9

Генерация фотонов микроволнового диапазона в системах сверхпроводящих кубитов

С.А. Гунин², А.Ю. Дмитриев², О.В. Астафьев^{1,2,3}

¹Skolkovo Institute of Science and Technology

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Physics Department, Royal Holloway, University of London

В данной работе разработана схема эксперимента по управляемой генерации фотонов микроволнового диапазона в системе сверхпроводящих кубитов. Между кубитами-трансмонами реализована пересатраиваемая магнитным потоком емкостная связь, также реализовано перестраиваемое граничное условие, позволяющее модулировать емкостную связь между излучающим кубитом и копланарным волноводом, что может быть использовано в том числе для изменения формы микроволнового фотона. Проведены симуляции динамики кубитов при перестройке частоты связывающего кубита магнитным потоком, просимулирована динамика состояния излучающего кубита, продемонстрирована возможность изменения формы фотона путем модуляции потока через шунтирующий излучающую линию СКВИД.

Расчет матриц емкостей проводился в ANSYS Maxwell, расчет резонансных частот считывающих резонаторов (три считывающих резонатора для каждого кубита в дисперсионном режиме) проводился в Sonnet. Общий вид образца (сделан в KLayout):

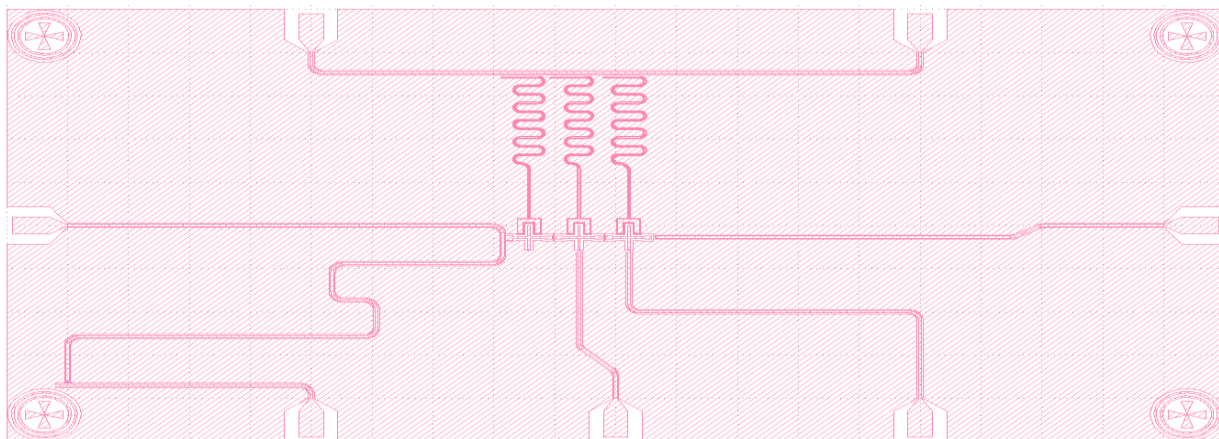


Рис. 1. Послойные чертежи схемы эксперимента

В приближении двухуровневых систем три взаимодействующих емкостным образом кубита могут быть описаны при помощи данного гамильтониана (введены понижающие и повышающие операторы):

$$H = \sum_{j=1,2} \frac{\omega_j \sigma_j^z}{2} + \frac{\omega_c \sigma_c^z}{2} + \sum_{j=1,2} g_j (\sigma_j^+ \sigma_c^- + \sigma_j^- \sigma_c^+) + g_{12} (\sigma_1^+ \sigma_2^- + \sigma_1^- \sigma_2^+) \quad (1)$$

Излучающий и возбуждаемый кубит взаимодействуют посредством связи со средним кубитом, а также через виртуальные фотоны, что описывается членом g_{12} . Применив преобразование Шриффера-Вольфа [1], можно трактовать данную систему, как взаимодействие двух кубитов с перестраиваемой связью.

Применив преобразование

$$\exp \left[\sum_{j=1,2} (g_j / (\omega_j - \omega_c)) (\sigma_j^+ \sigma_c^- - \sigma_j^- \sigma_c^+) \right] \quad (2)$$

Получим преобразованный гамильтониан системы

$$H' = \sum_{j=1,2} 0.5 (\omega_j + g_j^2 / (\omega_j - \omega_c)) + (g_{12} + 0.5 g_1 g_2 (1/(\omega_1 - \omega_c) + 1/(\omega_2 - \omega_c))) (\sigma_1^+ \sigma_2^- + \sigma_1^- \sigma_2^+) \quad (3)$$

Отсюда видно, что эффективная связь между двумя кубитами есть функция частоты связывающего кубита; также существует точка выключения связи.

Для расчета динамики кубитов был использован гамильтониан с duffing oscillator [3]

$$H = \omega_1 b_1^+ b_1 - E_{c_1} b_1^+ b_1^+ b_1 b_1 + \omega_2 b_2^+ b_2 - E_{c_2} b_2^+ b_2^+ b_2 b_2 + \omega_c b_c^+ b_c - E_{c_c} b_c^+ b_c^+ b_c b_c + H_{1c} + H_{2c} + H_{12} \quad (4)$$

$$H_{1c} + H_{2c} + H_{12} = g_1 (b_1^+ b_c + b_1 b_c^+ - b_1^+ b_c^+ - b_1 b_c) + g_2 (b_2^+ b_c + b_2 b_c^+ - b_2^+ b_c^+ - b_2 b_c) + g_{12} (b_1^+ b_2 + b_1 b_2^+ - b_1^+ b_2^+ - b_1 b_2) \quad (5)$$

Также реализовано перестраиваемое граничное условие. На расстоянии четверть длины волны (соответствующей частоте кубита-излучателя) расположен шунтирующий СКВИД. Через петлю с током возможна модуляция потока, что влечет за собой изменение распределения напряжений в копланарном волноводе. Таким образом, можно контролировать наличие узла по напряжению или пучности, что позволяет контролировать связь кубита-излучателя и линии [2].

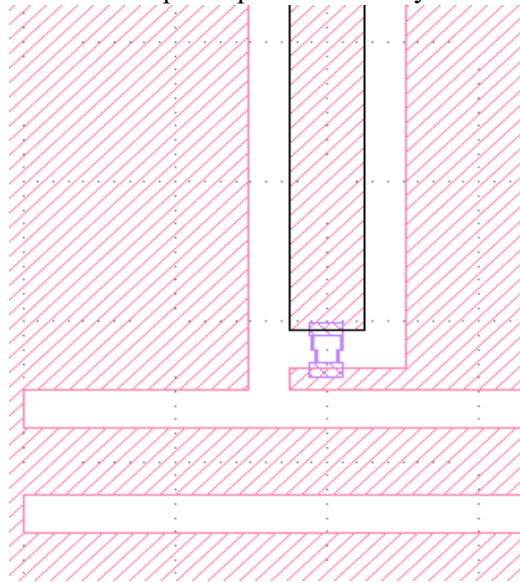


Рис. 2. Перестраиваемое граничное условие

Таким образом, можно предложить следующую схему для эффективной генерации фотона: устанавливаем магнитный поток, пронизывающий связывающий кубит, который отключает эффективную связь, перестраиваем граничное условие, возбуждаем систему π импульсом, далее модулируем поток через связывающий кубит, чтобы эффективно включить связь на определенное время (время выполнения SWAP операции), выключаем связь, модулируем поток через СКВИД (чтобы включить связь с линией/поменять форму фотона). Эффективность генерации ограничена точностью выполнения SWAP операции. Также промоделировано изменение формы фотона при модуляции связи с излучающей линией. Гамильтониан, описывающий взаимодействие двухуровневой системы с модами поля в линии:

$$H = \hbar \sum_n \omega_n a_n^\dagger a_n + 0.5 \hbar \omega_q \sigma_z - \hbar \sum_n g_n (a_n^\dagger \sigma^- + a_n \sigma^+) \quad (6)$$

Отсюда численно найдена эволюция проекции состояния кубита во времени (проекция состояния кубита-излучателя на состояние с первоначально возбужденным кубитом, связанным с возбуждающей линией). Физические параметры соответствуют представленным в планируемом эксперименте. В расчете просимулировано 100 000 мод поля. Связь каждой моды с кубитом записывается как:

$$g_k = 2e \frac{C_c}{C} \left(\frac{E_J}{8E_c} \right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\hbar \omega_k / (Lc_0)} \quad (7)$$

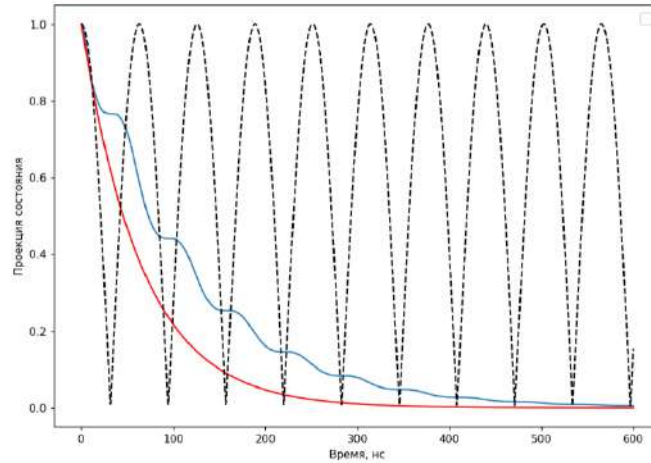


Рис. 3. Эволюция проекции состояния излучающего кубита во времени при перестройке связи с линией. Красным обозначена эволюция без изменения связи с линией. Синим обозначена эволюция при изменении связи кубита с линией во времени. Вид модулирующей во времени функции обозначен прерывистой черной линией.

В данной системе также возможно генерировать запутанные состояния типа GHZ, W [4].

Литература

1. *Sergey Bravyi, David P. DiVincenzo, and Daniel Loss*, Schrieffer–Wolff transformation for quantum many-body systems, *Ann. Phys.* 326, 2793 (2011).
2. On-Demand Microwave Generator of Shaped Single Photons, *P. Forn-Díaz, C. W. Warren, C. W. S. Chang, A. Sung, Morten Kjaergaard, Daniel L. Campbell, Terry P. Orlando, Simon Gustavsson, and William D. Oliver*, *Phys. Rev. Applied* 10, 054062 – Published 28 November 2018
3. Tunable Coupling Scheme for Implementing High-Fidelity Two-Qubit Gates. *Fei Yan, Philip Krantz, Youngkyu Sung, Morten Kjaergaard, Daniel L. Campbell, Terry P. Orlando, Simon Gustavsson, and William D. Oliver*, *Phys. Rev. Applied* 10, 054062 – Published 28 November 2018
4. *Besse, J., Reuter, K., Collodo, M.C. et al.* Realizing a deterministic source of multipartite-entangled photonic qubits. *Nat Commun* 11, 4877 (2020)

УДК: 538.945

Исследование различия фаз аномальных функций Грина и фазы параметра порядка в диффузных джозефсоновских контактах

А.С. Осин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Сколковский институт науки и технологий

В работе изучается решение уравнений Узаделя [1] для контакта типа-SIS в диффузном пределе, дополненных граничными условиями Куприянова-Лукичёва [2]. В частности, в ультратонном режиме изучается различие фаз аномальных функций Грина и фазы параметра порядка. В работе проведена теория возмущений по параметру прозрачности границы до второго порядка и было выяснено, что в первом порядке по прозрачности фазы не различаются, однако наблюдается

обратная ситуация во втором порядке. Получено и решено численными методами интегральное уравнение, позволяющее найти фазы аномальных функций Грина для любой частоты в ультратонком пределе.

Литература

1. Klaus D. Usadel, Generalized diffusion equation for superconducting alloys, Physical Review Letters, vol.25, n.8, 24.08.1970.
2. M. Yu. Kuprianov and V. F. Lukichev, Influence of boundary transparency on the critical current of "dirty" SS'S structures, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 94,139-149 (June 1988)

УДК 538.945

Исследование сверхпроводящих гибридных структур на основе магнитных топологических изоляторов

А.В. Кудряшов^{1,2}, А.Г. Шишкин^{1,2}, В.С. Столяров^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² ВНИИА им. Н.Л. Духова

Ожидается, что эффект близости в магнитных топологических изоляторах (МТИ) проявится в виде нетрадиционной сверхпроводимости, что является хорошим условием для изучения Майорановских мод. Таким образом, мы представляем результаты экспериментальных исследований dc-СКВИДа на основе МТИ Джозефсоновского контакта, показанного на рис. 1а.

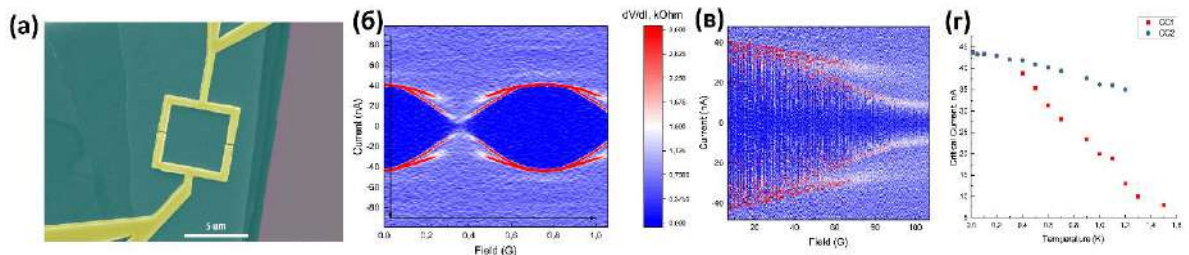


Рис. 1. (а) SEM-изображение исследуемого dc-СКВИДа. Серым цветом обозначена подложка, зеленым – кристалл МТИ, жёлтым – ниобиевые контакты. (б) Карта дифференциального сопротивления dc-СКВИДа как функция внешнего магнитного поля и тока. (в) Карта дифференциального сопротивления dc-СКВИДа как функция внешнего магнитного поля и тока. Модуляция критического тока Джозефсоновскими контактами. Т=25 мК. (г) Зависимость критических токов от температуры в нулевом магнитном поле.

Период осцилляций соответствует площади dc-СКВИДа. Стрелками обозначены направления развёртки. Т=25 мК. (в) Карта дифференциального сопротивления dc-СКВИДа как функция внешнего магнитного поля и тока. Модуляция критического тока Джозефсоновскими контактами. Т=25 мК. (г) Зависимость критических токов от температуры в нулевом магнитном поле.

При изготовлении dc-СКВИДа был использован монокристалл BiSbTe₂Se, легированный 1% железа, с высоким объемным сопротивлением, выращенный с помощью модифицированного метода Бриджмана. Затем, при помощи процедуры эксфолиации был выделен флэйк толщиной 160 нм, на который при помощи электронной литографии, магнетронного напыления и методики взрывной литографии были подведены контакты из Nb толщиной 250 нм. Площадь СКВИДа составила 25 мкм². Сформированные зазоры между сверхпроводящими берегами джозефсоновских контактов составили 150 нм. Магнетотранспортные измерения проводились в криостате растворения BlueFors LD250, оснащённом сверхпроводящим соленоидом с полем до 9Т. Вольт-амперные характеристики снимались с использованием цифровых приборов (источник тока Keithley 6220 и нановольтметр Keithley 2182). Для фильтрации шумов применялся двухкаскадный RC-фильтр с частотой среза 10 Гц.

На рис.1б представлены квантовые осцилляции критического тока от величины внешнего магнитного поля. Период осцилляций соответствует площади SQUIDA. Критический ток изменяется в диапазоне от 44 нА до нуля, вблизи нуля становясь сложно измеримым вследствие теплового размытия. Такое поведение говорит о высокой степени симметричности Джозефсоновских контактов в устройстве. Также видно, что в определенном интервале магнитных полей и температур присутствуют два критических тока, которые мы будем называть I_{c1} и I_{c2} . $I_{c1} \sim \left| \cos\left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0}\right) \right|$ тогда как I_{c2}

также имеет период, соответствующий площади SQUIDa, однако не достигает нуля. В больших полях, вместо стандартной модуляции критического тока Фраунтгоферовской зависимостью наблюдается монотонный спад критического тока, при этом при определенном значении магнитного поля два критических тока расщепляются, как показано на рис. 1в. Температурная зависимость критических токов показана на рис. 1г. Видно, что критический ток уменьшается при увеличении температуры практически линейно, а также при температуре 0,4 К происходит расщепление критических токов. Практически линейный ход температурной зависимости может свидетельствовать о баллистической природе джозефсоновской связи в контактах dc-СКВИДа [1]. Полученные экспериментальные результаты требуют дальнейших теоретических и экспериментальных исследований с целью выяснения природы второго критического тока.

Работа выполнена при поддержке РФФИ 19-52-50026.

Литература

1. Stolyarov, V.S., Yakovlev, D.S., Kozlov, S.N. et al. Josephson current mediated by ballistic topological states in $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.3}\text{Se}_{0.7}$ single nanocrystals // *Commun. Mater.* (2020) 1, 38

УДК 538.945

Масштабируемые элементы джозефсоновской магнитной памяти на основе прямоугольных джозефсоновских контактов с ферромагнитным барьером.

Ш.А. Эркенов^{1,2}, Л.Н. Карелина¹, Р.А. Оганнисян², В.В. Больгинов^{1,2}

¹Институт физики твердого тела РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время развитие сверхпроводящих вычислительных систем сдерживается отсутствием масштабируемой энерго-эффективной памяти, технологически совместимой с элементами быстрой одноквантовой логики (БОК, RSFQ) [1]. Наиболее сложно-решаемой выглядит проблема масштабирования. Например, в работе [2] в качестве элемента памяти использовался одноконтактный сверхпроводящий интерферометр, хранящий или не хранящий квант магнитного потока. Такие элементы обладают удовлетворительными частотными характеристиками, однако не могут масштабироваться до субмикронных размеров [3], поскольку хранение кванта магнитного потока требует достаточно большой индуктивности интерферометра. В работе [4] в качестве элементов памяти предлагались многослойные джозефсоновские контакты на основе разбавленного ферромагнитного сплава $\text{Pd}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}$. Частотная совместимость с БОК-логикой была достигнута в [5-6] путем использования комбинированного барьера, содержащего туннельный слой диэлектрика. Кодирование цифровой информации в таких элементах производилось через наличие или отсутствие остаточной намагниченности ферромагнетика. Считывание цифрового состояния производится в нулевом внешнем магнитном поле путем измерения критического тока. При наличии остаточной намагниченности F-слоя ее поток уменьшает критический ток контакта согласно соотношению Фраунгофера. Поскольку поток вектора намагниченности есть произведение его величины на магнитную длину и размер контакта, данная реализация тоже сталкивается с проблемой масштабирования. В работах [4-6] минимальный размер логического элемента составлял 10 мкм, а возможность дальнейшего уменьшения размера является предметом рассмотрения данной работы.

В данной работе мы развиваем концепцию прямоугольных элементов джозефсоновской магнитной памяти (JMM), предложенной нами в работе [7]. Предполагается, что в обоих цифровых состояниях ферромагнетик намагничен до насыщения, а информация кодируется через ориентацию намагниченности по отношению к длинной стороне контакта. Очевидно, что при ориентации «поперек короткой стороны» критический ток контакта будет больше, чем в состоянии «поперек длинной стороны». На первый взгляд, короткая сторона контакта может уменьшаться вплоть до технологического предела. В данной работе мы представляем практическую реализацию прямоугольных элементов памяти и анализируем лимитирующие факторы их миниатюризации.

Прямоугольный JMM-элемент должен располагаться на пересечении двух сверхпроводящих линий. Протекание тока вдоль каждой линии переводит логический элемент в одно из двух цифровых состояний. Пропускание тока между двумя линиями используется для процедуры считывания. Изготовление образцов может производиться с использованием многослойного тонкопленочного процесса, описанного в [4]. Нами был изготовлен бинарный логический элемент размером

10x30 мкм, переключавшийся между уровнями напряжения 0 и 100 мкВ при токе питания 0.45 мА. Также нами был исследован JMM размером 10x50 мкм, поскольку концепция прямоугольных JMM предполагает использование образцов с наибольшим возможным отношением сторон. Вследствие увеличения площади контакта и его критического тока, стали существенными эффекты собственного поля тока питания, снявшие вырождение состояний JMM для двух возможных направлений остаточной намагниченности поперек длинной стороны. В результате, нам удалось создать троичный логический элемент, который может иметь дополнительную актуальность для практических приложений.

В наших технологических условиях минимальный размер контакта был ограничен технологическим пределом 10 мкм. Поэтому анализ возможностей миниатюризации производился при помощи численного моделирования. Предполагалось, что слой ферромагнетика толщиной 15 нм содержит слабо взаимодействующие магнитные кластеры размером порядка 10 нм с плотностью заполнения 50%. Распределение кластеров было аппроксимировано двумерной квадратной сеткой с размером стороны 100x100 нм что соответствует ранее полученным экспериментальным работам [8]. В работе [7] было показано, что такая модель хорошо описывает перемагничивание мезоскопических слоев PdFe. Для моделирования использовалась программа OOMMF [9]. Параметры модели выбирались на основе ранее проведенных экспериментов по наблюдению ферромагнитного резонанса в тонкопленочных структурах PdFe [10,7].

Было показано, что увеличение аспектного соотношения приводит к изменению петли гистерезиса слоя PdFe из-за разнонаправленного изменения тензора форм-фактора для двух сторон JMM при переходе от квадратного к прямоугольному контакту. Негативным следствием данного эффекта является уменьшение остаточной намагниченности для направления поперек длинной стороны, а также к уменьшению напряжения в цифровом состоянии «1». Моделирование показывает, что допустимый диапазон токов питания схлопывается при отношении длины к ширине около 50. Значит минимальная ширина JMM-элемента равна 0.2-0.3 мкм при разумной длине 10 мкм, определяемой свойствами используемого нами ферромагнетика $\text{Pd}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}$.

Работа представлена при поддержке грантов РФФИ №20-02-00864 и №19-32-90162. Авторы выражают благодарность сотрудникам ИФТТ РАН Н.С. Степакову, В.Н. Шилову и Л.С. Успенской, а также сотрудникам НИТУ МИСиС И.А. Головчанскому и В.И. Чичкову за участие в технологических работах, проведении экспериментов и обсуждении экспериментальных результатов.

Литература

1. D. S. Holmes, A. L. Ripple, and M. A. Manheimer, "Energy-Efficient Superconducting Computing — Power Budgets and Requirements," *IEEE Trans. Appl. Supercond.*, vol. 23, no. 3, p. 1701610, 2013.
2. S. Nagasawa, K. Hinode, T. Satoh, Y. Kitagawa, and M. Hidaka, "Design of all-dc-powered high-speed single flux quantum random access memory based on a pipeline structure for memory cell arrays," *Supercond. Sci. Technol.*, vol. 19, pp. 325–330, 2006.
3. T. Orllepp and T. Van Duzer, "Access Time and Power Dissipation of a Model 256-Bit Single Flux Quantum RAM," *IEEE Trans. Appl. Supercond.*, vol. 24, no. 4, p. 1300307, 2014.
4. V. V. Bol'ginov, V. S. Stolyarov, D. S. Sobanin, A. L. Karpovich, and V. V. Ryazanov, "Magnetic switches based on Nb-PdFe-Nb Josephson junctions with a magnetically soft ferromagnetic interlayer," *JETP Lett.*, vol. 95, no. 7, pp. 366–371, 2012.
5. T. I. Larkin et al., "Ferromagnetic Josephson switching device with high characteristic voltage," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 100, no. 22, pp. 222601-1–4, 2012.
6. S. V. Bakurskiy et al., "Theoretical model of superconducting spintronic SIFS devices," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 102, no. 19, pp. 192603-1–4, 2013.
7. I. A. Golovchanskiy et al., "Micromagnetic modeling of critical current oscillations in magnetic Josephson junctions," *Phys. Rev. B*, vol. 94, p. 214514, 2016.
8. L. S. Uspenskaya, A. L. Rakhmanov, L. A. Dorosinskii, S. I. Bozhko, V. S. Stolyarov, and V. V. Bolginov, "Magnetism of ultrathin Pd 99 Fe 01 films grown on niobium," *Mater. Res. Express*, vol. 1, no. 3, p. 036104, 2014.
9. M. J. Donahue, D. G. Porter, and M. D. Gaithersburg, "OOMMF." <http://math.nist.gov/oommf>.
10. I. A. Golovchanskiy et al., "Magnetization dynamics in dilute $\text{Pd}_{1-x}\text{Fe}_x$ thin films and patterned microstructures considered for superconducting electronics," *J. Appl. Phys.*, vol. 120, no. 16, pp. 163902-1–6, 2016.

Микроволновая спектроскопия динамики вихрей Абрикосова

Д.С. Калашиников^{1,2}, В.И. Ружицкий², В.С. Столяров^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²ВНИИА им. Н.Л. Духова

В данной работе исследовались характеристики планарного микроволнового сверхпроводящего резонатора во внешнем магнитном поле. В ходе исследования было установлено, что Абрикосовские вихри, проникающие в пленку резонатора заметно влияют на его характеристики. Для усиления вклада единичных вихрей Абрикосова в изменение свойств резонатора был создан образец резонатора с заужением, участок которого изображен на рис. 1. Пропуская вдоль измерительного волновода микроволновой сигнал, измерялся коэффициент пропускания S_{21} . Для определения параметров резонатора, а именно: его частоты, полной, внутренней добротности и добротности связи - использовался метод аппроксимации предложенный в работе [1].

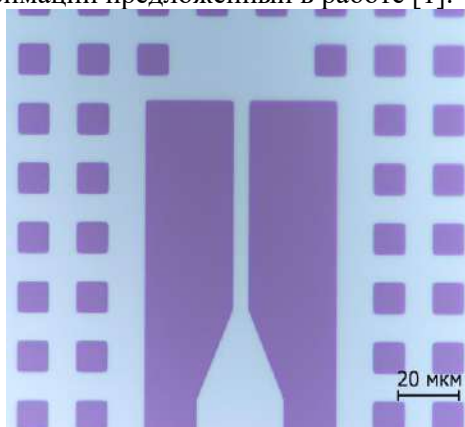


Рис. 1. Оптическое изображение ниобиевого копланарного резонатора с заужением в месте соединения центральной линии с землей

В результате работы была показана возможность детектирования проникновения единичного вихря Абрикосова в резонатор, предоставляя возможность исследования их индивидуального и коллективного поведения с помощью микроволнового излучения. На рис. 2 представлен участок зависимости коэффициента пропускания (показан цветом) от частоты подаваемого излучения и внешнего магнитного поля и зависимость полной добротности резонатора от магнитного поля. Было выявлено, что скачки происходят с определенной периодичностью, связанной с квантованием магнитного потока в вихре Абрикосова. Помимо этого в работе были описаны процессы, происходящие в резонаторе в магнитном поле, связанные с наличием вихрей Абрикосова. Используя модель Норриса-Бранта-Инденбома (Norris-Brant-Indenbom model) проникновения магнитного поля в сверхпроводник II рода [2, 3] и распределения переменного тока по резонатору [4], были объяснены основные особенности зависимости коэффициента пропускания резонатора от магнитного поля, наблюдаемые в эксперименте, связанные со скачкообразным поведением данной зависимости.

Исследования проводятся при финансовой поддержке РФФ 20-69-47013. Также мы выражаем благодарность коллегам: Болгару А., Головчанскому И.А., Соловьеву И.И. за содействие в выполнении исследований.

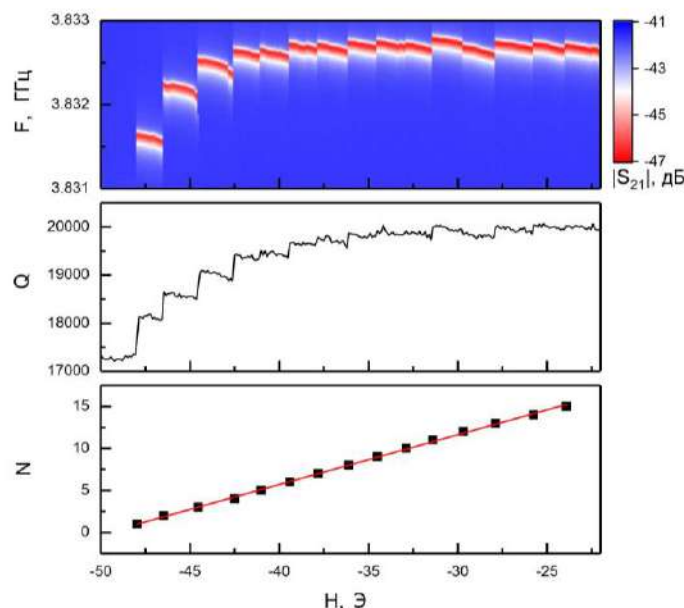


Рис. 2. Изображения: зависимости коэффициента пропускания (показан цветом) от частоты подаваемого излучения и внешнего магнитного поля (верхнее), зависимость полной добротности резонатора от магнитного поля (среднее) и зависимость номера скачка от магнитного поля (нижнее). По нижнему графику определяется период скачков.

Литература

1. Probst S., Song F.B., Bushev P.A., Ustinov A.V., and Weides M. Efficient and robust analysis of complex scattering data under noise in microwave resonators. Rev. Sci. Instrum. 2015. V. 86, 024706.
2. Norris W.T. Calculation of hysteresis losses in hard superconductors carrying ac: isolated conductors and edges of thin sheets. J. Phys. D: Appl. Phys. 1970. V. 3, 489-507.
3. Brandt E.H., Indenbom M. Type-II-superconductor strip with current in a perpendicular magnetic field. Physical review B. 1993. V. 48, 12893.
4. Lahl P. and Wordenweber R. Probing microwave properties of high-Tc films via small dc magnetic fields. Appl. Phys. Lett. 2002. V. 81, 505.

УДК 538.94

Одноатомный мазер на основе трансмона

А.А. Соколова^{1,2,3}, Г.П. Федоров^{1,2,3}

¹ Российский квантовый центр

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³ НИТУ МИСиС

В данной работе произведено моделирование одноатомного лазера на основе трансмона с искусственным источником инверсной заселенности. Продемонстрированы такие нестандартные свойства, как наличие или отсутствие порога накачки в зависимости от параметров, преодоление фотонной блокады, ограничивающей накачку более чем одного фотона в режиме сильной связи, бистабильность функции Вигнера, излучение неклассического света с суб-Пуассоновской и супер-Пуассоновской статистикой.

Необходимым свойством любого лазера является инверсная заселенность. Ее достижение возможно с помощью двухфотонной накачки уровня $|f\rangle$ трансмона. Однако, чтобы заселенность уровня $|e\rangle$ значительно превышала заселенность уровня $|g\rangle$, необходима дополнительная диссипация $|f\rangle \rightarrow |e\rangle$. Мы предлагаем обеспечить ее с помощью связи системы со вспомогательным низкодобротным резонатором, имеющим частоту перехода $|e\rangle \leftrightarrow |f\rangle$. Кроме того, как и в обычном лазере, необходим резервуар, в который фотоны будут накачиваться. В нашей системе им является еще один резонатор на частоте $|g\rangle \leftrightarrow |e\rangle$. Схема системы представлена на Рис. 1 (а, б).

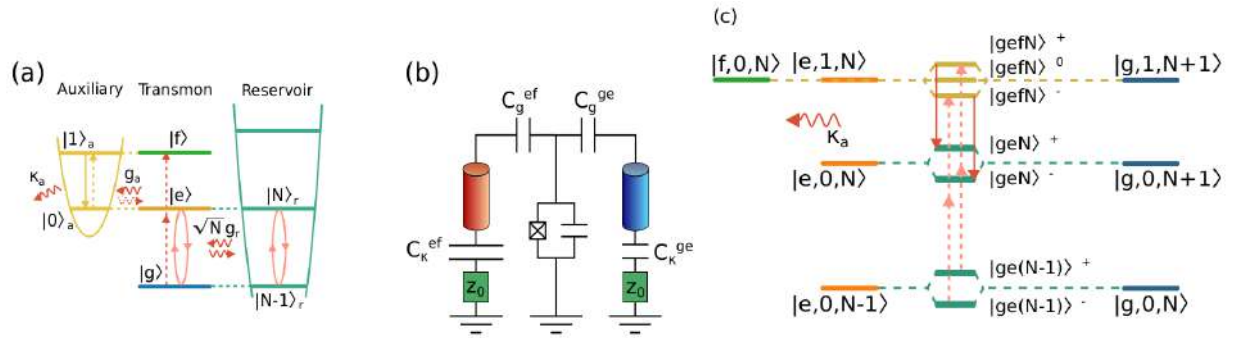


Рис. 1. **(а)** Структура энергетических уровней (без учета связи между подсистемами). Слева (желтый) — вспомогательный резонатор, по центру — трансмон, справа (голубой) — резонатор-резервуар. **(б)** Схема устройства. Красный резонатор - вспомогательный, синий — резервуар. **(с)** Энергетический спектр системы для большого числа накаченных фотонов N . Пунктирные розовые линии — двухфотонная накачка, красные линии — диссипация фотонов. Синие уровни соответствуют $|g\rangle$ - уровню трансмона, оранжевые - $|e\rangle$ и зеленые - $|f\rangle$. В обозначении энергетических уровней буква обозначает уровень трансмона, первая цифра — число фотонов во вспомогательном резонаторе, вторая — в резервуаре.

Для корректного рассмотрения системы необходимо учесть расщепления энергетических уровней из-за связи трансмона с резонаторами. Структура энергетических уровней с их учетом представлена на Рис. 1 (с). Можно выделить 2 типа расщеплений — вследствие вырождения уровней $|e, 0, N\rangle$ и $|g, 0, N+1\rangle$ и уровней $|f, 0, N\rangle$, $|e, 1, N\rangle$ и $|g, 1, N+1\rangle$. В классических схемах одноатомных лазеров в режиме сильной связи нет вспомогательного резонатора, поэтому присутствуют только расщепления первого типа [1]. В таких схемах величина расщепления зависит от числа накаченных фотонов как $\sqrt{N}$ [2], что приводит к фотонной блокаде [3] — невозможности когерентной накачки большого количества фотонов вследствие отстройки частоты накачки от разницы энергий уровней. В нашей системе присутствует второй тип расщеплений, величина которого также пропорциональна $\sqrt{N}$ при больших N . Это приводит к тому, что разности энергий уровней, между которыми происходит накачка, не зависят от N , делая возможной когерентную накачку большого числа фотонов, несмотря на фотонную блокаду. Моделирование в QuTip показывает, что при определенных параметрах системы возможно накачать более 50 фотонов в режиме сильной связи.

Моделирование показало, что для данной системы возможен как режим с порогом накачки, так и без порога. Число накаченных фотонов и Фано-фактор для различных режимов показаны на Рис. 2 (а-д). В различных режимах возможны состояния с Фано-фактором больше и меньше 1, что свидетельствует о неклассических свойствах излучаемого света, а именно о суб-Пуассоновской и супер-Пуассоновской статистике фотонов. Наличие и отсутствие порога накачки можно определить по Рис. 2 (е, ф).

Наличие порога накачки в режиме сильной связи в нашем случае вызвано теми же особенностями структуры энергетических уровней, которые привели к преодолению фотонной блокады. Вследствие того, что частота накачки входит в резонанс с разницей энергий уровней системы только при больших N , энергетические уровни при $N \ll \infty$ оказываются незаселенными, что видно на Рис. 2 (г). Однако при больших Ω оказывается возможной накачка высших уровней без участия промежуточных. Та величина Ω , при которой это становится возможным, и определяет порог накачки, что проявляется в резком увеличении числа накаченных фотонов и скачке Фано-фактора, свидетельствующем о высоких флуктуациях интенсивности, характерных для фазового перехода.

При условиях, когда система находится на границе порога, функция Вигнера резонатора выглядит как два концентрических кольца (Рис. 2 (h)), то есть состояние является бистабильным. При дальнейшем увеличении мощности накачки бистабильность исчезает (Рис. 2 (i)).

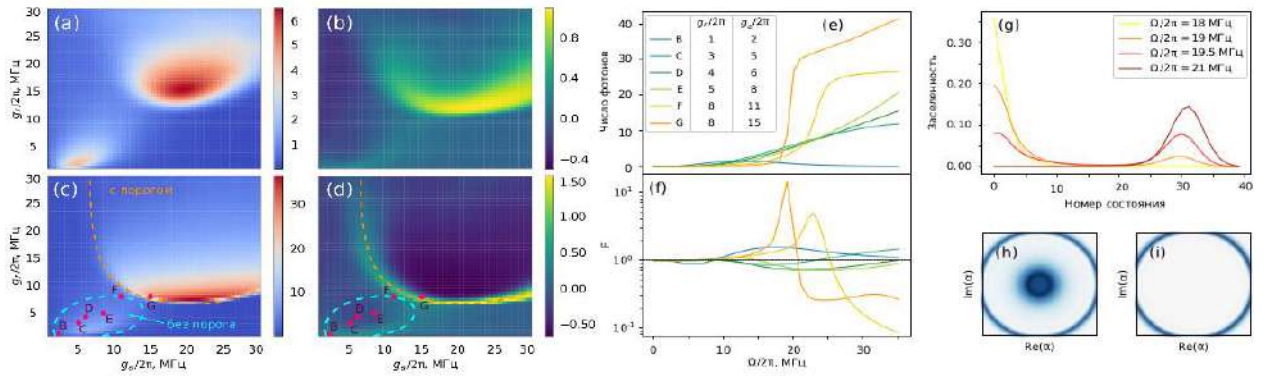


Рис. 2. (a, b) Число накачанных фотонов и (c, d) логарифм Фано-фактора в зависимости от констант связи при $\kappa_a = 138$ МГц — диссипация вспомогательного резонатора, $\kappa_r = 0.2$ МГц — резервуара. (a, b) $\Omega/2\pi = 15$ МГц — величина накачки, (c, d) $\Omega/2\pi = 20$ МГц. Буквы обозначают различные комбинации параметров. Оранжевая пунктирная линия обозначает переход в режим с порогом накачки и голубая пунктирная линия — в режим без порога. (e) Число фотонов в резервуаре в зависимости от Ω для связей g_r и g_a , соответствующих точкам B-F на (c, d), указанных на графике в МГц, $\kappa_a = 138$ МГц, $\kappa_r = 0.2$ МГц. (f) Фано-фактор для тех же параметров, что и на (e). (g) Состояние равновесия резервуара при различных Ω и параметрах, соответствующих G на (c, d). (h, i) Функции Вигнера резервуара для параметров на (g) и (h) $\Omega/2\pi = 19.5$ MHz, (i) $\Omega/2\pi = 21$ MHz

Литература

1. *Boozer A.D. et al.* Comparison of theory and experiment for a one-atom laser in a regime of strong coupling// Physical Review A — 2004 — Т. 70 — № 2 — С. 023814
2. *Blais A. et al.* Cavity quantum electrodynamics for superconducting electrical circuits: An architecture for quantum computation// Physical Review A — 2004 — Т. 69 — № 6 — С. 062320
3. *Birnbaum K.M. et al.* Photon blockade in an optical cavity with one trapped atom// Nature — 2005 — Т. 436 — № 7047 — С. 87-90

УДК 538.945

Tunable microwave transmission line

J.I. Zotova^{1,2}, A.V. Semenov³ I.N. Khrapach^{1,4}, R. Wang^{1,2}, Y. Zhou^{1,2}, J.S. Tsai^{2,5}, O.V. Astafiev¹

¹Moscow Institute of Physics and Technology

²RIKEN

³Moscow State Pedagogical University

⁴Russian Quantum Center

⁵Tokyo University of Science

In this work three types of transmission lines (TLs) are investigated and compared: distributed element TL (coplanar waveguide) and two types of lumped-element TLs (Fig.1). The first of the lumped element TLs is fabricated using conventional interdigital capacitance and a wire inductance, the second one consists of a series of compact elements – Josephson junction as inductance and parallel plate capacitance. Inductance of a Josephson junction can be tuned by applied current. As a consequence TL impedance is tuned: $Z = \sqrt{L/C}$, where Z is impedance of the TLs, C is total capacitance (fixed), L is a total inductance (changed by applied AC current and therefore power). Due to this effect we observed transmission tunability by changing applied power.

Fabrication details are the following. All patterns are fabricated on a Si chip from niobium film by means of photolithography which is followed by dry CF₄ etching procedure. Josephson junctions are made of aluminum and evaporated in two different vacuum cycles in Plassys MEB550S machine. The parallel plate capacitance was formed of two aluminum electrodes with aluminum oxide dielectric layer between them. Evaporation and oxidation steps are also performed using Plassys MEB550S machine.

The chips are measured at 20mK in a dilution refrigerator. A Vector Network Analyzer (VNA) was used for frequency domain measurement.

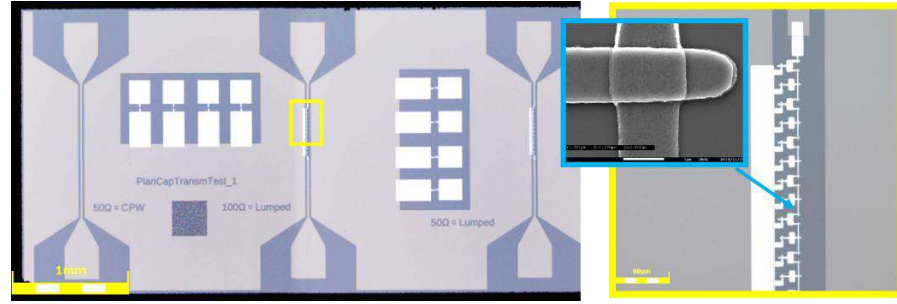


Fig. 1. A chip photograph of the investigated structures. Top: distributed and lumped element (conventional IDC) TLs and enlarged part of a chain with inductance and capacitance. Bottom: distributed and lumped element TLs for 50Ω and 100Ω impedances with enlarged area (SEM image).

Conventional coplanar waveguide was used for transmission calibration. The measurement result of the first chip is shown in the fig.2.

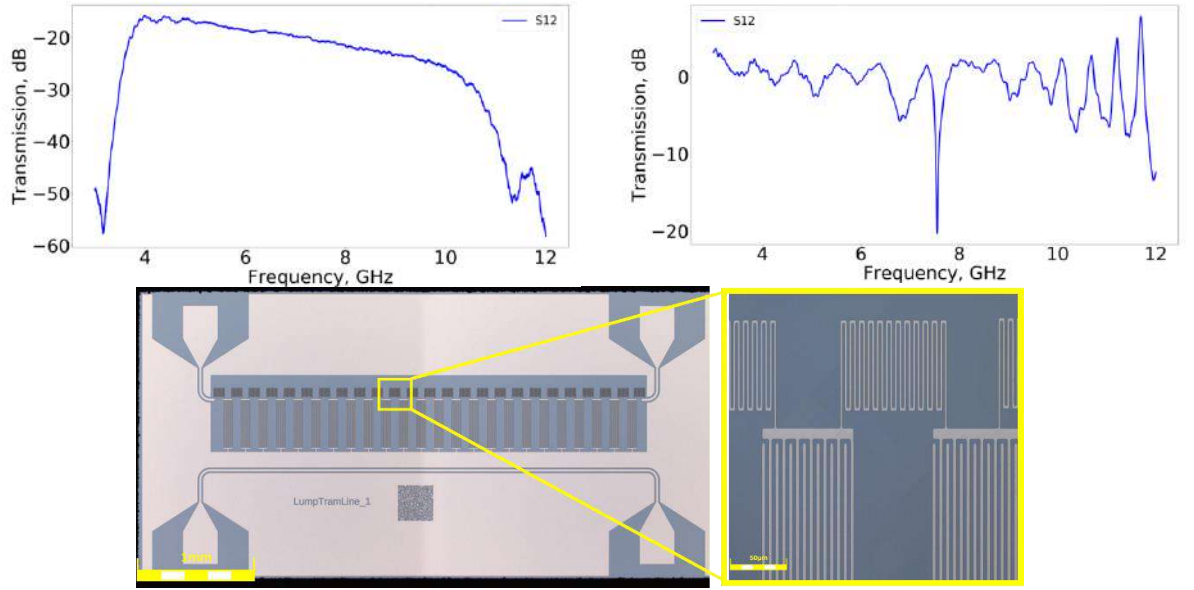


Fig. 2. The measurement result of the first chip. Left: Distributed element TL, right: lumped element TLs.

The calibrated measurement results of the second chip are shown in the fig.3. There is a clear transmission tunability by power. The corresponding reflection measurement is shown in fig.4. The reflection is tunable by applied power. Therefore, we can conclude that the transmission tunability could be explained by both impedance mismatching and increasing intrinsic losses.

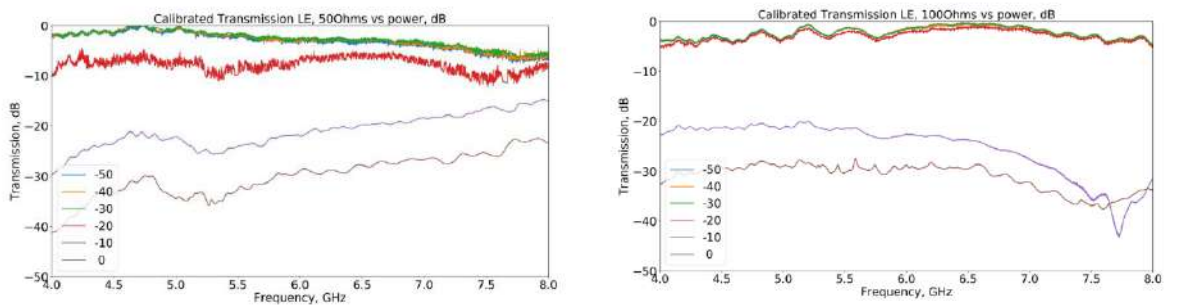


Fig. 3. The measurement result of the second chip. Different color means different power applied from VNA.

Left: 50Ω impedance TL, right: 100Ω impedance TL.

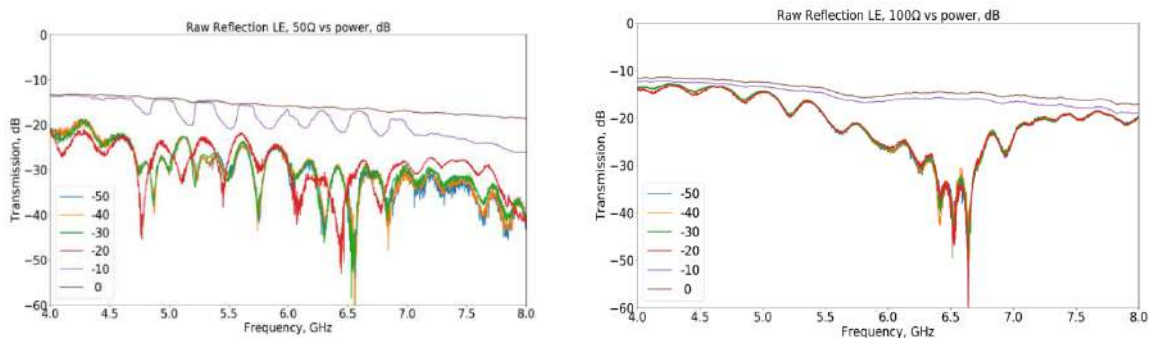


Fig. 4. The reflection measurement result of the second chip. Different color means different applied power from VNA. Left: 50Ω TL impedance, right: 100Ω TL impedance.

The key advantages of the presented TL are their tunability [1, 2] and opportunity to design phase velocity in a wide range. In this case, we can make phase velocity one order smaller than phase velocity of a coplanar waveguide: $v = \frac{\Delta X}{\sqrt{LC}} = 10^7 m/s$, where ΔX is a physical unit length[3]. This is important for miniaturise[4] circuits for quantum information processing.

References

1. B.F. Beaudoin, J.M. Gambetta, and A. Blais. Josephson-junction-embedded transmission-line resonators: From kerr medium to in-line transmon. //Physical Review A, 86(1):013814, 2012
2. Ustinov A. V.// Experiments with tunable superconducting metamaterials //IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology. – 2014. – T. 5. – №. 1. – С. 22-26.
3. David M.Pozar, Microwave Engineering // – John wiley & sons, 2011.
4. McRae C. R. H. et al. Dielectric loss extraction for superconducting microwave resonators //Applied Physics Letters. – 2020. – T. 116. – №. 19. – С. 194003.

УДК 53.05

Протокол калибровки двухкубитного CZ гейта

И.А. Симаков^{1,2}, И.С. Беседин²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²НИТУ МИСИС

Одной из базовых операций квантового компьютера являются двухкубитные гейты. В данном очерке представлена компьютерная симуляция протокола калибровки CZ гейта на трех связанных между собой трансмонах. Параметры системы представлены на рисунке 1, а гамильтониан записывается следующим образом:

$$\frac{\hat{H}(t)}{\hbar} = \sum_{i=0,1} v_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \sum_{i=0,1,2} \alpha_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i + \sum_{\substack{i=0,1,2 \\ j=i+1,2}} g_{ij} (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i) (\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j) + v_2(t) \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2.$$

Гейт реализуется посредством взаимодействия уровней $|11\rangle$ и $|20\rangle$ дата кубитов, которое индуцируется подачей на связывающий кубит сигнала на частоте этого перехода. Динамика системы описывается уравнением Линдблада, учитывающего каналы амплитудной и фазовой релаксации трансмонов:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \rho] + \sum_j [2\hat{L}_j \rho \hat{L}_j^\dagger - \{\hat{L}_j^\dagger \hat{L}_j, \rho\}].$$

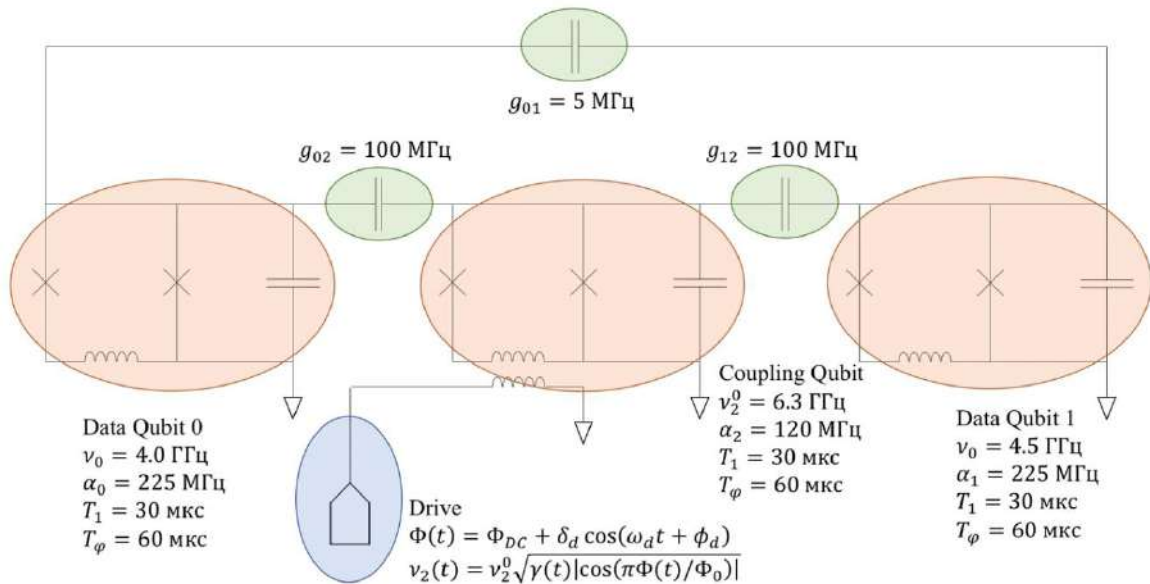


Рис.11. Принципиальная схема исследуемой системы. ν_i, α_i – частота и анггармонизм i -го кубита, g_{ij} – константа связи между кубитами, T_1, T_φ – времена амплитудной и фазовой релаксации, $\Phi_{DC}, \delta_d, \phi_d$ – параметры сигнала, γ – параметр, учитывающий асимметрию сквида.

При данном способе реализации CZ гейта, учитывая однокубитные вращения (φ_{01} и φ_{10}) и ZZ-взаимодействие кубитов (φ_ζ), итоговую эволюцию состояний дата кубитов можно приблизить следующим унитарными преобразованием:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi_{01}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\varphi_{10}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i(\varphi_g + \varphi_\zeta + \varphi_{01} + \varphi_{10})} \end{pmatrix}$$

Протокол калибровки можно разбить на следующие шаги (рисунок 2):

- 1) Наблюдение осцилляций Раби между уровнями $|11\rangle$ и $|20\rangle$ дата кубитов и определение оптимальной длительности импульса для различных частот сигнала при заданной амплитуде.
- 2) Определение фаз φ_{01} и φ_{10} однокубитных вращений вокруг оси z каждого кубита.
- 3) Подбор оптимальной фазы состояния $|11\rangle$ $\varphi = \varphi_g + \varphi_\zeta$, учитывающую статическую часть ZZ-взаимодействия.
- 4) Томография квантового процесса с найденными оптимальными параметрами.

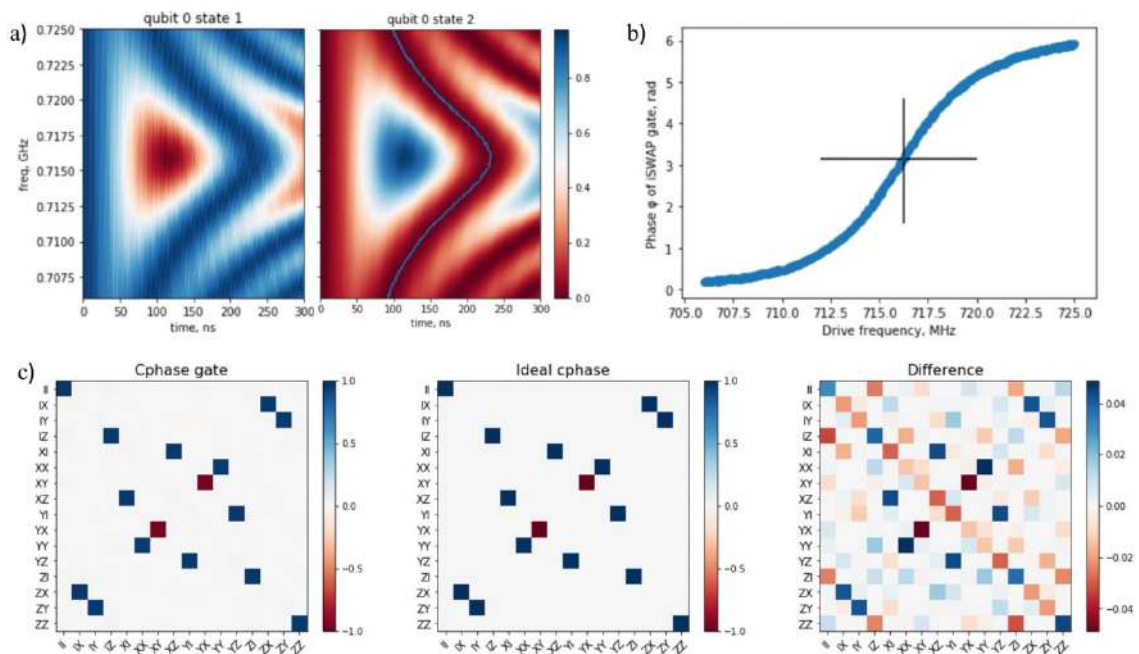


Рис.2. Иллюстрация некоторых шагов протокола калибровки CZ гейта. а) Шаг 1: осцилляции заселенностей первого и второго уровней дата кубита в зависимости от длительности и частоты сигнала; на правом графике синей кривой изображена оптимальная длительность гейта в зависимости от частоты. б) Шаг 2: зависимость фазы состояния $|11\rangle$ от частоты сигнала. в) Шаг 4: (слева направо) Квантовая томография CZ гейта с подобранными параметрами, идеального CZ гейта и их разность; результат представлен в базисе Паули.

Повторяя данную процедуру для различных амплитуд управляющего сигнала, следует определить его оптимальную силу и длительность. Для параметров, приведенных на рисунке 1, можно получить степень совпадения (фиделити) процесса больше 97%. Данный протокол примечателен тем, что может быть реализован в реальном эксперименте.

Литература

1. M. Ganzhorn, G. Salis, D. J. Egger, A. Fuhrer, M. Mergenthaler, C. Mller, P. Mller, S. Paredes, M. Pechal, M. Werninghaus, and S. Filipp, "Benchmarking the noise sensitivity of different parametric two-qubit gates in a single superconducting quantum computing platform," (2020).

УДК 538.945

Структура вихря в чистом сверхпроводнике вблизи плоского дефекта

У.Е. Ходаева^{1,2,3}, М.А. Скворцов^{2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Сколковский институт науки и технологий

²Институт теоретической физики им Л.Д. Ландау РАН

В данной работе изучается структура вихря на границе между двумя чистыми сверхпроводниками. Мотивацией для постановки задачи послужила представленная в 2018 году на конференции «Локализации, взаимодействия и сверхпроводимость» работа [1], в которой были исследованы свойства гранулированного алюминия в сверхпроводящем состоянии в магнитном поле. Увеличение числа гранул в заданном объеме приводило к росту добротности системы.

В отсутствие дефекта задача была решена Кароли, де Женом и Матриконом [2], где спектр локализованных низкоэнергетических состояний был найден в рамках квазиклассического приближения. Оказалось, что состояния классифицируются угловым моментом квазичастицы, а уровни энергии являются эквидистантными. Точное квантовое решение этой задачи было представлено в работе [3].

Для описания системы использовались уравнения Боголюбова-де-Жена [4]. Изначально был рассмотрен случай границы, проходящей через центр вихря. Для этого случая задачу удалось решить полностью аналитически, и в результате был получен спектр состояний, локализованных в коре вихря вблизи плоского дефекта (рис. 1), а также собственные функции. Также был рассмотрен случай вихря на расстоянии от дефекта, и в этом случае спектр был получен численно (рис. 2).

Основной результат работы — наличие щели в спектре локализованных состояний, пропорциональной силе дефекта. При этом величина щели может значительно превышать расстояние между исходными уровнями энергии уже при достаточно слабом дефекте. Этот эффект качественно отличается от эффектов [5], [6], [7], возникающих из-за наличия короткодействующих примесей, когда плотность состояний, будучи усредненной на масштабе порядка среднего расстояния между уровнями, оставалась практически постоянной. Максимальная величина щели наблюдается, если вихрь располагается строго на дефекте. По мере увеличения расстояния между центром вихря и дефектом щель линейно уменьшается, закрываясь на некотором расстоянии, определяемом силой дефекта.

Работа выполнена при поддержке программой фундаментальных исследований Президиума РАН.

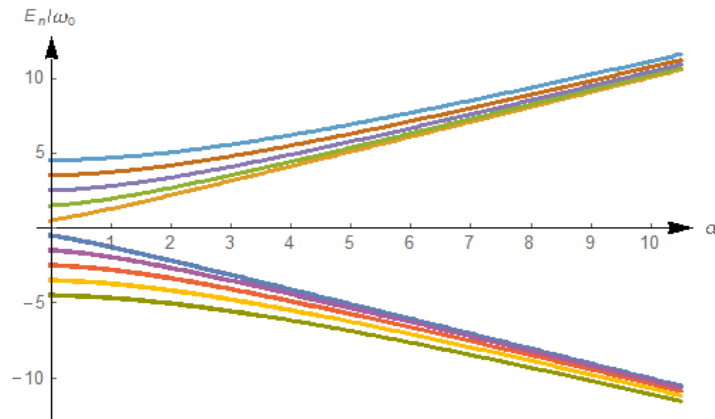


Рис. 1. Зависимость уровней энергии от силы дефекта. Энергия измеряется в расстояниях между уровнями в задаче без дефекта.

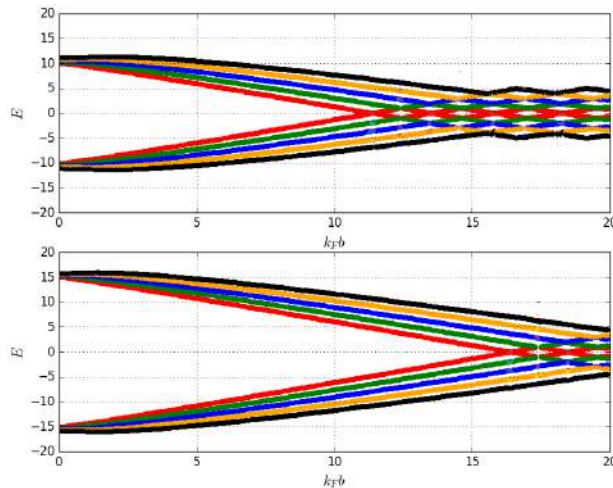


Рис. 2. Зависимость уровней энергии от расстояния от дефекта до центра вихря для величин силы дефекта, равных 10 и 15 соответственно.

Литература

1. Britton L. T. Plourde «Vortex Microwave Response in High Kinetic Inductance Superconducting Thin Films» // Workshop on Localization, Interactions and Superconductivity, Landau Institute, July 2, 2018.
2. C.Caroli, P.G. de Gennes, J.Matignon, «Bound fermion states on a vortex line in a type II superconductor», //Physics Letters, Volume 9, Issue 4, p. 307-309 (1964).
3. Skvortsov M.A., PhD thesis: «Level statistics and localization in two-dimensional systems with chiral electronic spectrum», // Landau Institute (1998).
4. P.G. de Gennes, «Superconductivity of metals and alloys», // New York, W.A. Benjamin (1966).

5. *L.Larkin and Yu. N. Ovchinnikov*, «Resistance of layered superclean superconductors at low temperatures», // Phys. Rev. B 57, 5457 (1998)
6. *A.Koulakov and A. I. Larkin*, «Vortex density of states and absorption in clean layered superconductors», // Phys. Rev. B 60, 14597 (1999)
7. *M. A. Skvortsov, D. A. Ivanov, G. Blatter* «Vortex viscosity in the moderately clean limit of layered superconductors», // Phys. Rev. B 67, 014521 (2003)

УДК: 538.945

Характеристики операций со сверхпроводниковыми кубитами

К.С. Дубовицкий

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Сколковский институт науки и технологий.

В работе был изучен метод случайного тестирования [1] для измерения ошибок операций в алгоритмах на квантовом компьютере. Метод тестирования, основанный на случайной выборке активно применяется для изучения качества выполнения логических операций многими экспериментальными группами [2] [3]. В большинстве таких работ полученные зависимости надежности от длины аппроксимируются экспонентой, без достаточного понимания того, насколько хорошо данная выборка усредняет ошибку. Поэтому было важно проверить насколько такая аппроксимация оправдана, а если нет, то какие зависимости следует ожидать. Также в случайном тестировании пренебрегают наличием корреляций между ошибками операций в последовательности, хотя наличие корреляций может нарушить экспоненциальное поведение зависимостей надежности. В случайном тестировании одного кубита у экспериментаторов имеется хорошее понимание того, что именно они измеряют. В случае же двух кубитов имеются существенные трудности. Из-за этого в некоторых работах по случайному тестированию двух кубитных операций встречается не совсем правильная интерпретация полученных данных. Поэтому основная часть этой работы посвящена случайному тестированию двух кубитов. Для однокубитных операций метод случайного тестирования выглядит следующим образом:

- 1) Кубит готовится в основном состоянии и генерируется случайный набор операций.
- 2) Над кубитом проводится серия этих операций:
 $V_1 V_2 \dots V_n F$, где $F = (V_1 V_2 \dots V_n)^+$
 Последняя операция F обеспечивает тождественность последовательности.
- 3) Измеряется итоговое состояние.
- 4) Генерируется новый набор операций.

Из-за наличия ошибок, вероятность обнаружить кубит в исходном состоянии оказывается меньше единицы. Итоговая ошибка складывается из ошибок измерения и приготовления, а также из-за ошибок операций V_i . Предполагается, что вероятность остаться в исходном состоянии будет описываться формулой:

$$P(n) = A + B a^n$$

Здесь n – количество операций. Ожидается, что вклад ошибок считывания и приготовления будет описываться коэффициентами A и B , а средняя ошибка V_i будет содержаться в основании степенной зависимости a .

Основная часть работы про случайное тестирование двухкубитных операций. Особенность в том, что усреднение будет происходить по группе Клиффорда [4] одного кубита умножить прямо на себя (вращения типа $g \otimes h$, где g, h элементы из группы Клиффорда для одного кубита). Эта группа состоит из $24 \cdot 24 = 576$ элементов и является подгруппой группы Клиффорда двух кубитов 1. Последняя состоит из 11520 элементов и, как известно, при усреднении по ней получается один параметр для ошибки. Логично ожидать, что при усреднении по однокубитным вращениям, свести ошибку к одному параметру не удастся. Тем не менее такое неполное усреднение используется в реальных экспериментах, потому что, во-первых, реализовать все 11520 элементов двухкубитной группы затруднительно, во-вторых, однокубитные вращения умеют выполнять с меньшей ошибкой, чем двухкубитные операции.

В нашей модели мы будем изучать последовательности операций над двумя кубитами вида:

$$V_1 W V_2 W \dots W V_n F$$

Здесь V_i – тензорное произведение операций над первым и вторым кубитом (не запутывает кубиты между собой), а операция W – двухкубитный вентиль, это может быть CNOT или $\sqrt{\text{SWAP}}$. Предполагается, что ошибки V_i малы на фоне ошибки W . Такое приближение обусловлено тем, что однокубитные операции имеют более высокую точность в современных квантовых компьютерах. Представим W в виде:

$$W = W_0 \Lambda$$

Здесь за W_0 обозначена чисто унитарная часть, а за Λ – ошибка (формально супероператор над матрицей плотности двух кубитов), в силу малости близка к тождественному оператору. Можно показать, что суммарная усредненная ошибка от последовательности длины n подчиняется рекуррентному соотношению:

$$\overline{\Lambda_{n+1}} = \langle V \Lambda W_0 \overline{\Lambda_n} W_0^+ V^+ \rangle$$

Здесь усреднение ведется по операции V , которые пробегают прямое произведение групп Клиффорда одного кубита. При таком усреднении ошибка описывается тремя параметрами, которые в свою очередь связаны линейным соотношением через матрицу M .

Три собственных значения последней являются основаниями показательной функции в надежности от длины последовательности. Таким образом, задача описания поведения надежности сводится к нахождению матрицы линейной связи и ее спектра.

В данной работе был изучен метод случайного тестирования для измерения ошибок логических операций в алгоритмах на квантовом компьютере. Были получены и проверены основные свойства, такие как: один параметр при усреднении по группе Клиффорда, экспоненциальная зависимость надежности последовательности от её длины. В случае двух кубитов был развит метод неполного усреднения по однокубитным операциям. Были получены три параметра для такого усреднения. Было выяснено, что в общем случае имеется линейная связь между параметрами через матрицу M на разных длинах последовательности. Из спектральных характеристик этой матрицы можно выяснить какие зависимости следует ожидать на графике надежности от длины последовательности. Была найдена матрица M для основных двух кубитных вентилей. Данное исследование актуально, так как метод случайного тестирования активно применяется многими экспериментальными группами в области квантовых вычислений.

Литература

1. Emanuel Knill, D Leibfried, R Reichle, J Britton, RB Blakestad, John D Jost, C Langer, R Ozeri, Signe Seidelin, and David J Wineland, "Randomized benchmarking of quantum gates," Physical Review A 77, 012307 (2008).
2. Yu Chen, C. Neill, P. Roushan, N. Leung, M. Fang, R. Barends, J. Kelly, B. Campbell, Z. Chen, B. Chiaro, A. Dunsworth, E. Jeffrey, A. Megrant, J. Y. Mutus, P. J. J. O'Malley, C. M. Quintana, D. Sank, A. Vainsencher, J. Wenner, T. C. White, Michael R. Geller, A. N. Cleland, and John M. Martinis, "Qubit Architecture with High Coherence and Fast Tunable Coupling," Phys. Rev. Lett. 113, 220502 (2014).
3. L. Casparis, T. W. Larsen, M. S. Olsen, F. Kuemmeth, P. Krogstrup, J. Nyg'ard, K. D. Petersson, C. M. Marcus, "Gatemon Benchmarking and TwoQubit Operation," arXiv:1512.09195, (2015)
4. Maris Ozols, "Clifford group," (2008)

УДК 533.922

Шум краевого тока в двумерном топологическом изоляторе, связанный с рассеянием назад на магнитной примеси

Б.В. Пашинский

Сколковский институт науки и технологий
Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Магнитные примеси с достаточно сильной анизотропией могут объяснить наблюдаемое сильное отклонение краевой проводимости 2D топологических изоляторов от ожидаемого баллистического значения. В данной работе мы рассматриваем такие краевые состояния, взаимодействующие с магнитными примесями с произвольным спином S и общим видом обменной матрицы. Мы вычисляем шум тока обратного рассеяния на конечных частотах в зависимости от температуры и приложенного напряжения. Мы обнаружили, что в дополнение к лоренциановскому резонансу на

нулевой частоте шум обратного рассеяния имеет резонансы типа Фано на ненулевых частотах. Ширина резонансов контролируется спектром соответствующих времен Корринги. На фиксированной частоте шум обратного рассеяния в зависимости от напряжения смещения имеет немонотонный характер.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 20-52-12013).

Литература

1. Pashinsky B. V., Goldstein M., Burmistrov I. S. Finite frequency backscattering current noise at a helical edge // Phys. Rev. B 2020 V. 102, P. 125309

УДК 53.05

Экспериментальное исследование массива трансмонов

Г.С. Мажорин^{1,2,3}, И.Н. Москаленко^{2,3}, И.С. Беседин^{2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²НИТУ МИСИС

³Российский квантовый центр

В работе проведено экспериментальное исследование коллективного взаимодействия массива кубитов, связанных с общим резонатором. Дизайн чипа представлен на рис. 1.

В качестве кубитов использовались перестраиваемые по потоку трансмоны. Массив трансмонов может быть описан с помощью гамильтониана Тэйвиса-Каммингса [1].

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}h \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_z^i \nu_i + h\nu_{com} \hat{a}_{com}^\dagger \hat{a}_{com} + h \sum_{i=1}^N g_{com}^i (\hat{a}_{ind}^{i\dagger} + \hat{a}_{ind}^i) (\hat{\sigma}_+^i + \hat{\sigma}_-^i) + h \sum_{i=1}^N g_{ind}^i (\hat{a}_{ind}^{i\dagger} + \hat{a}_{ind}^i) (\hat{\sigma}_+^i + \hat{\sigma}_-^i) + h \sum_{i=1}^N \nu_{ind}^i \hat{a}_{ind}^{i\dagger} \hat{a}_{ind}^i, \quad (1)$$

где ν_{com} – частота общего резонатора, ν_{ind}^i – частота индивидуального резонатора i -го кубита, ν_i – частота i -го кубита, $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ – понижающий и повышающий операторы резонаторов, $\hat{\sigma}_+^i$ и $\hat{\sigma}_-^i$ – i -го кубита, $\hat{\sigma}_z^i$ – оператор Паули i -го кубита, g_{com}^i – константа связи i -го кубита и общего резонатора, g_{ind}^i – константа связи i -го кубита и индивидуального резонатора.

Параметры кубитов, резонаторов, а также влияние перекрестных наводок линий индивидуального контроля частот кубитов (матрица взаимных индуктивностей) были экспериментально определены в процессе калибровки с помощью однотоновой и двухтоновой спектроскопии. Для поиска параметров кубитов, резонаторов и констант связи использовалась упрощенная модель связанных осцилляторов.

Индивидуальный контроль параметров кубитов позволил экспериментально измерить и сопоставить с моделью зависимость величины коллективной связи резонатора от числа связанных с ним кубитов (Vacuum Rabi mode splitting). На рис. 2а представлен пример амплитуды прохождения микроволнового сигнала через общий резонатор системы взаимодействующий с 16-тью кубитами.

Измерены и сопоставлены с теоретическим расчетом мезоскопические флуктуации амплитуды прохождения в ансамбле кубитов [2], связанные с измерениями различных реализаций разброса частот индивидуальных кубитов вокруг частоты общего резонатора. На рис. 2б представлен пример зависимости для амплитуды разброса 100 МГц.

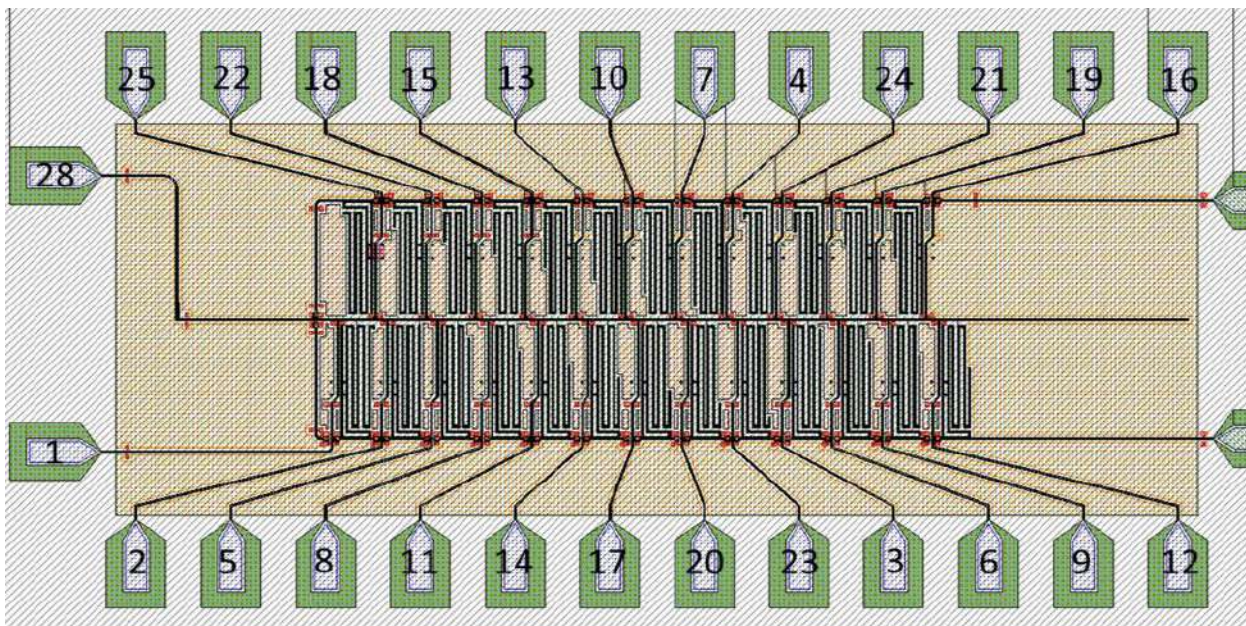


Рис.1 Чип состоит из 25 кубитов, 25 считывающих резонаторов, общего резонатора связанного со всеми кубитами, 25 линий индивидуального контроля потока (1-25), управляющая микроволновая линия для считывания на прохождение (26-27) и на отражение (28)

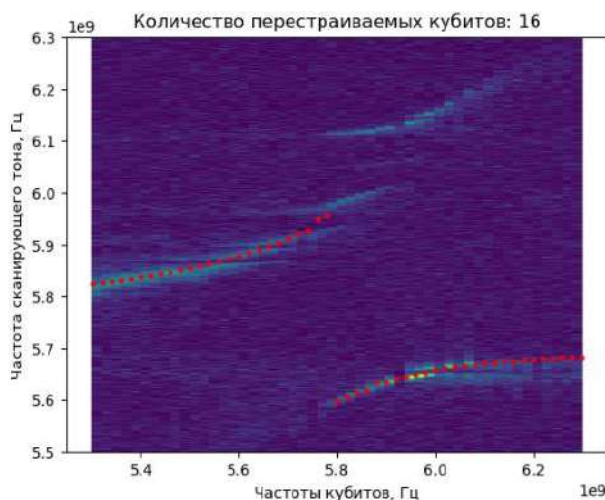


Рис. 2а Однотоновый спектр общего резонатора и рассчитанная по модели Тэйвиса-Каммингса частота (красные точки). По горизонтальной оси отложены частоты перестраиваемых кубитов, оставшиеся кубиты находились в частоте 5 ГГц, по второй оси частота сканирующего тона, а цветом показана амплитуда прохождения.

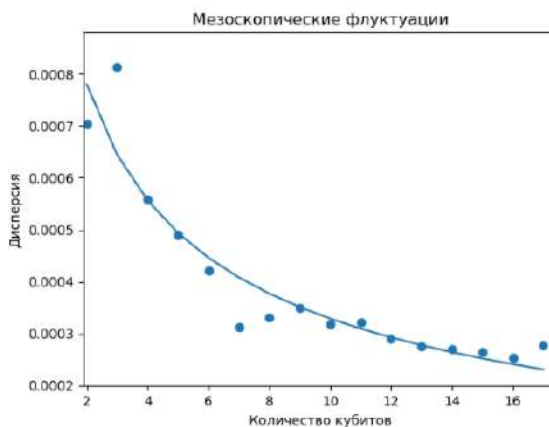


Рис. 2б Измерение мезоскопических флуктуаций в зависимости от количества участвующих в нем кубитов. На экспериментальные точки наложена теоретическая зависимость.

Литература

1. *Tavis M. and Cummings F. W.*, Exact Solution for an N-Molecule-Radiation-Field Hamiltonian, Phys. Rev. 170, 379 (1968).
2. *Zhukov A.A., Shapiro D.S., Pogosov W.V., and Lozovik Yu.E.*, Dynamics of a mesoscopic qubit ensemble coupled to a cavity: Role of collective dark states, Phys. Rev. A 96, 033804 (2017)

Секция теоретической физики

Председатель: Ю.М. Белоусов (д.ф.-м.н., профессор)
Зам. председателя: В.П. Крайнов (д.ф.-м.н., профессор)
Секретарь: И.В. Черноусов

Дата: 28.11.2020 Время: 12:20

УДК 539.1.01

ЛНС как фотон-фотонный коллайдер: ограничения на $\Gamma_{X \rightarrow \gamma\gamma}$

М.И. Высоцкий¹, В.А. Новиков¹, С.И. Годунов¹, Е.В. Жемчужов¹, Е.К. Каркарьян^{2,3}

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Институт теоретической и экспериментальной физики

ЛНС можно рассматривать как фотон-фотонный коллайдер, в котором фотоны испускаются протонами в ультрапериферических столкновениях протонов. Коллаборация CMS наблюдала резонанс [1] с массой $m=28$ ГэВ в процессах рождения мюонной пары в протон-протонных столкновениях с энергией в системе центра масс 13 ТэВ. С помощью метода эквивалентных фотонов [2] выводятся аналитические выражения для сечений рождения мюонной пары в ультрапериферических столкновениях протонов в Стандартной Модели и в расширенной путем введения скалярной частицы X , соответствующей резонансу, наблюдаемому коллаборацией CMS. Ширина распада и константа взаимодействия скалярной частицы X с мюонами приведены в [3]; взаимодействие X с фотонами вводится феноменологически в лагранжиан Стандартной Модели: $\Delta\mathcal{L} = \kappa F_1^{\mu\nu} F_{2\mu\nu} \mathcal{X}$, где κ - константа взаимодействия X с фотонами, $F_1^{\mu\nu}$, $F_{2\mu\nu}$ - тензоры электромагнитного поля фотонов, $\mathcal{X}$ - волновая функция скалярной частицы X . Значения сечений, вычисленные теоретически, сравниваются с экспериментальными значениями, приведенными в [4]. Сравнение показывает, что сечение рождения мюонной пары с промежуточным резонансом X в ультрапериферических столкновениях протонов $\sigma(X) < 0.04$ пбс уровнем достоверности 95%; ограничение на ширину распада X в фотоны при $\text{Br}(X \rightarrow \mu\mu) = 100\%$ получается $\Gamma_{X \rightarrow \gamma\gamma} < 7 \times 10^{-7} M_X$ с уровнем достоверности 95%, при $\Gamma_X = \Gamma^{\text{эксп}} - \Gamma_{X \rightarrow \gamma\gamma} < 8 \times 10^{-4} M_X$ с уровнем достоверности 95%. Проведенный анализ является универсальным, и может быть применен к исследованию других резонансов, если они существуют.

Литература

1. Sirunyan A et al. (CMS Collaboration), J. High Energy Phys. 11,161(2018).
2. Vysotsky M I, Zhemchugov E V, Phys. Usp.62910–919 (2019); Translated from Russian: UFN,189, 975 (2019).
3. Godunov S I, Novikov V A, Rozanov A N, Vysotsky M I, Zhemchugov E V, JHEP,01(2020) 143.
4. Aaboud M et al. (The ATLAS Collab.) Phys. Lett. B777303 (2018).

УДК 530.145

Аналитическое исследование спектрального форм-фактора в модели SYK

Е.Н. Ланина^{1,2}, М.А. Храмцов³

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова

³Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

Мы исследуем модель Сачдева-Йе-Китаева (SYK) [1, 2], определяемую гамильтонианом

$$H = \frac{i^{q/2}}{q!} \sum_{i_1, \dots, i_q=1}^N j_{i_1 \dots i_q} \psi_{i_1} \dots \psi_{i_q} \quad (1)$$

Здесь ψ_i – майорановские фермионы, а $j_{i_1 \dots i_q}$ – абсолютно антисимметричные константы связи, распределенные по Гауссу:

$$P(j_{i_1 \dots i_q}) = \sqrt{\frac{qN^{q-1}}{2^q(q-1)! \pi J^2}} e^{-\frac{qN^{q-1} j_{i_1 \dots i_q}^2}{2^q(q-1)! J^2}}.$$

Мы изучаем спектральный форм-фактор, усредненный по беспорядку следующим образом

$$S(\beta, T) = \frac{1}{\langle Z(\beta)^2 \rangle} \langle Z(\beta + iT) Z(\beta - iT) \rangle, \quad (2)$$

где Z – статистическая сумма в SYK, в пределе двойного скейлинга: $N \rightarrow +\infty$, $q \rightarrow +\infty$, $\lambda = \frac{q^2}{N}$ (3) фиксировано.

Можно выразить усредненный по беспорядку числитель формулы (2) в терминах биллокальных полей $G_{\alpha\beta}$ и $\Sigma_{\alpha\beta}$ [3] так же, как в статсумме для двух копий SYK [2, 4]. Безразмерная константа связи в SYK в лоренцевой сигнатуре $-JT$, поэтому замена $T \rightarrow T \pm i\beta$ эквивалентна умножению J на множитель $(1 \pm i\frac{\beta}{T})$. Это значит, что когда мы выводим функциональный интеграл в терминах биллокальных полей, надо работать с гамильтонианами для двух копий SYK: $H_\alpha = \frac{i^{q/2}}{q!} \sum_{i_1, \dots, i_q=1}^N j_{i_1 \dots i_q}^\alpha \psi_{i_1}^\alpha \dots \psi_{i_q}^\alpha$ где $\alpha = L, R$ – репличный индекс. Константы связи распределены по Гауссу с масштабами $J_L = (1 - i\frac{\beta}{T})J$, $J_R = (1 + i\frac{\beta}{T})J$ соответственно. Итоговый функциональный интеграл в терминах $G_{\alpha\beta}$ и $\Sigma_{\alpha\beta}$ будет иметь такой же вид, как статсумма для двух копий SYK с заменой $J^2 \rightarrow J_\alpha J_\beta$.

В лоренцевой сигнатуре мы имеем выражение для действия [3]:

$$\frac{I[G, \Sigma]}{N} = -\log \text{Pf} [\delta_{\alpha\beta} \partial_t - \hat{\Sigma}_{\alpha\beta}] + \frac{1}{2} \int_0^T \int_0^T dt_1 dt_2 \left(\Sigma_{\alpha\beta}(t_1, t_2) G_{\alpha\beta}(t_1, t_2) - \frac{2^{q-1} J_\alpha J_\beta}{q^2} s_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta}^q(t_1, t_2) \right) \quad (4)$$

где $s_{LL} = s_{RR} = -1$, $s_{LR} = s_{RL} = i^q$. Отсюда можно легко получить уравнения движения.

В данной работе мы рассматриваем случай $\beta = 0$. Тогда $J_\alpha = J$ и предполагается, что седловые точки зависят только от $t = t_1 - t_2$. Решения уравнений движения при малых временах находятся в виде разложения по малому параметру $1/q$.

Зависимость спектрального форм-фактора от времени численно исследована в работах [3, 5, 6] и выглядит следующим образом. При относительно небольших временах спектральный форм-фактор спадает – область склона. Затем, при больших временах он линейно растет, т.н. рампа. Наконец, форм-фактор после линейного роста выходит на постоянное значение – плато. В нашей работе аналитически исследованы области рампы и склона.

Чтобы исследовать область рампы в SYK при большом q , мы ищем реплика-недиагональное решение уравнений движения для действия (4):

$$G_{\alpha\alpha}(t) = \frac{1}{2} \text{sgn}(t) \left(1 + \frac{g_{\alpha\alpha}(t)}{q} + r_{\alpha\alpha} o\left(\frac{1}{q}\right) \right) \quad (5)$$

$$G_{LR}(t) = \frac{i}{2} \left(1 + \frac{g_{LR}(t)}{q} + r_{LR} o\left(\frac{1}{q}\right) \right), \quad G_{RL}(t) = -\frac{i}{2} \left(1 + \frac{g_{RL}(t)}{q} + r_{RL} o\left(\frac{1}{q}\right) \right) \quad (6)$$

где $g_{\alpha\beta}$ являются решениями уравнений Лиувилля

$$e^{g_{RR}(t)} = e^{g_{LL}(t)} = \left[\frac{\cosh^2(b)}{\cosh^2(J|t| \cosh(b)+b)} \frac{\sin^2(\tilde{b})}{\sinh^2(J|t| \sin(\tilde{b}) \pm i\tilde{b} \pm \sigma)} \right], \quad e^{g_{LR}(t)} = e^{g_{RL}(t)} = \left[\frac{\cosh^2(b)}{\cosh^2(Jt \cosh(b)+b+\sigma)} \frac{\sin^2(\tilde{b})}{\sinh^2(Jt \sin(\tilde{b}) \pm i\tilde{b} \pm \sigma)} \right] \quad (7)$$

а константы интегрирования находятся из граничного условия $g_{\alpha\alpha}(0) = 0$, которое определяет правильное ультрафиолетовое поведение, и из склейки с решениями уравнений движения на больших временах; здесь мы применяем подход, использованный в [7]. Из последних условий мы также устанавливаем, что решение, описывающее рампу существует только при $JT \sim q \log q$.

Мы связываем σ со сдвигом по времени: $\sigma = \pm J \cosh(b) \Delta$ или $\sigma = \pm J \sin(\tilde{b}) \Delta$, тогда решения при малых временах связаны следующим образом:

$$g_{LL}(t + \Delta) = g_{LR}(t), \quad (8)$$

и мы получаем, что действие на уравнениях движения равно нулю с точностью до экспоненциально подавленных вкладов, как и должно быть на рампе.

Область склона описывается реплика-диагональными решениями (5) с $G_{LR} = G_{RL} = 0$, где $g_{\alpha\alpha}$ также являются решениями уравнений Лиувилля

$$e^{g_{\alpha\alpha}(t)} = \left\{ \frac{\cosh \frac{\tilde{a}_{\alpha\alpha}}{2}}{\cosh[\tilde{a}_{\alpha\alpha}(\frac{1}{2} - \frac{t}{T})]} \right\}^2, \quad \tilde{a}_{\alpha\alpha}^2 = (JT)^2 \cosh^2 \frac{\tilde{a}_{\alpha\alpha}}{2}, \quad (9)$$

причем это решение справедливо на всех временах, поэтому константы интегрирования определяются из условия $g_{\alpha\alpha}(0) = 0$ и условия симметричности решения относительно $T/2$.

На этом решении действие принимает вид

$$\lambda I_{DS} = 2\tilde{a}_{LL} \tanh \frac{\tilde{a}_{LL}}{2} - \frac{\tilde{a}_{LL}^2}{2} + (\tilde{a}_{LL} \rightarrow \tilde{a}_{RR}). \quad (10)$$

Учитывая однопетлевые поправки к спектральному форм-фактору на фоне седловых точек, соответствующих склону и рампе, мы получаем спектральный форм-фактор на рампе

$$S(T) = \text{const} * T, \quad (11)$$

а на склоне

$$S(T) = \frac{\text{const}}{(JT)^3} e^{-I_{DS}}, \quad (12)$$

где I_{DS} определяется выражением (10).

Таким образом, мы получили аналитическое решение (7), описывающее рампу, а также решение (9), описывающее область склона. Выражения (11), (12) для спектрального форм-фактора на этих седловых точках согласуются с ранее полученными численными результатами [3].

Литература

1. Sachdev S. and Ye J.. Gapless spin fluid ground state in a random, quantum Heisenberg magnet // Phys. Rev. Lett. 70, 3339, 1993.
2. Kitaev A. and Suh S. J.. The soft mode in the Sachdev-Ye-Kitaev model and its gravity dual // JHEP 05 183, 2018.
3. Saad P., Shenker S. H. and Stanford D.. A semiclassical ramp in SYK and in gravity // arXiv:1806.06840 [hep-th].
4. Aref'eva I., Khramtsov M., Tikhanovskaya M. and Volovich I.. Replica-nondiagonal solutions in the SYK model // JHEP 07 113, 2019.
5. García-García Antonio M., Verbaarschot Jacobus J. M.. Spectral and thermodynamic properties of the Sachdev-Ye-Kitaev model // Phys. Rev. D 94 12, 126010, 2016.
6. Cotler J.S., Gur-Ari G., Hanada M. et al. Black holes and random matrices // JHEP 05 118, 2017.
7. Maldacena J. and Qi X. L.. Eternal traversable wormhole // arXiv:1804.00491 [hep-th]

УДК 530.145, 539.1.01

Бигармоническое пространство для N=4 суперсимметричной теории Янга-Миллса

В.А. Ивановский

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

$N = 4$ суперсимметричная теория Янга-Миллса (SYM) в четырехмерном пространстве Миньковского обладает нетривиальными свойствами. Например, ее бета-функция равна нулю, и модель суперконформна. Также эта модель связана с теорией струн через AdS /CFT соответствие. Низкоэнергетическое эффективное действие $N=4$ SYM теории играет важную роль в проверке этого соответствия. Согласно [1], его можно связать с эффективным действием D3-браны, распространяющейся на фоне AdS_5 . Для нахождения эффективного действия удобно использовать технику гармонического суперпространства.

Суперпространство является обобщением пространства Миньковского и позволяет явно и в простой форме реализовывать преобразования суперсимметрии. В теориях с расширенной суперсимметрией важную роль играет понятие гармонического суперпространства [2], которое позволяет реализовывать симметрии теории вне массовой поверхности.

Для $N = 4$ суперсимметричной теории Янга-Миллса не существует суперполевого формализма, в котором все суперсимметрии реализованы вне массовой поверхности и выражаются явно. Таким образом, нельзя написать суперсимметричное эффективное действие вне массовой поверхности. Поэтому для построения суперсимметрично инвариантных выражений и в особенности эффективного действия были разработаны подходы с использованием различных гармонических суперпространств [3].

В этой работе используется другой подход. Мы решаем стандартные связи $N=4$ SYM теории в бигармоническом суперпространстве. Основным новым результатом здесь является решение этих

связей в терминах $N=2$ суперполей. Благодаря этому свойству можно простым способом построить $N=4$ суперсимметрично инвариантные выражения в терминах $N=2$ суперполей. Такой подход предоставляет удобный инструмент для построения явно $N=4$ суперсимметрично инвариантных выражений в гармоническом суперпространстве, которые могут входить в эффективное действие в качестве следующих поправок.

Аналогичный метод был ранее разработан для $N=(1,1)$ SYM теории в шести измерениях[4].

Литература

1. J. M. Maldacena, The large N limit of superconformal field theories and supergravity, Int. J. Theor. Phys. 38 (1999) 1113 [Adv. Theor. Math. Phys. 2 (1998) 231]
2. A.S. Galperin, E.A. Ivanov, V.I. Ogievetsky, E.S. Sokatchev. Harmonic superspace//Cambridge, UK: Univ. Pr. (2001)
3. L. Buchbinder, E. A. Ivanov, I. B. Samsonov. The Low-Energy $N=4$ SYM Effective Action in Diverse Harmonic Superspaces// Phys. Part. Nucl. 48 (3) (2017) 333
4. Guillaume Bossard, Evgeny Ivanov, Andrei Smilga, Ultraviolet behavior of 6D supersymmetric Yang-Mills theories and harmonic superspace. JHEP 12 (2015) 085.

УДК 53.043

Влияние приливных сил на измерения аномального магнитного момента мюона

В.А. Шмидт¹, А.Б. Арбузов²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт ядерных исследований

Измерение g -фактора мюона хорошо известно как уникальный тест Стандартной Модели с широкой чувствительностью к новым взаимодействиям, частицам и явлениям. Эксперимент Muon ($g-2$) позволит устранить давнее расхождение в 3.5 сигма между результатом в Брукхейвене и прогнозом Стандартной Модели. По словам [1], эксперимент Fermilab Muon ($g-2$) завершил свой второй сбор данных (Run-2) в период с марта по июль 2019 года, и в настоящее время продолжается анализ данных Run-1 и Run-2. Мы же пока попытаемся выяснить возможные причины расхождения данных с экспериментом в Брукхейвене. Оказывается, эти расхождения могут быть вызваны влиянием приливных сил. Таким образом, будет предпринята попытка объяснения расхождений между предсказаниями Стандартной Модели и экспериментальными данными с Брукхейвена.

Основная цель эксперимента — определение мюонной магнитной аномалии $a_\mu = \frac{g-2}{2}$ с точностью до 140ppb, которая связана с частотой аномальной прецессии, определяемой как разность между спиновой и циклотронной частотами, как

$$\omega_a = \left(\frac{g-2}{2} \right) \frac{e}{m} B = a_\mu \frac{e}{m} B$$

где e — элементарный заряд, m — масса мюона, B — приложенное магнитное поле.

Согласно экспериментальным данным [2] с Brookhaven National Laboratory (BNL), относительная величина расхождений предсказаний Стандартной Модели и эксперимента в BNL имеет порядок 10^{-7} Того же порядка (см. формулу (1)) должно быть и относительное изменение частоты прецессии спина мюона.

Эксперименты по измерению угла наклона земной поверхности по отношению к Луне и Солнцу показали, что наблюдаются периодические 12-часовые сигналы амплитуды $\alpha = 0.16 \times 10^{-6}$

Это означает, что относительное изменение кривизны земной поверхности в месте проведения эксперимента порядка α . Последнее, в свою очередь, позволяет нам говорить о том, что относительное удлинение земной поверхности в данном месте есть величина того же порядка, а значит, того же порядка и относительное изменение расстояния между опорами коллайдера, то есть относительное изменение радиуса ускорителя.

В то же время, простейшие теоретические оценки, произведённые в докладе показывают, что относительное удлинение приповерхностного слоя Земли из-за влияния Луны $\approx 0.48 \times 10^{-7}$.

Таким образом получается, что влияние приливных сил, точнее, гравитации Луны, вполне может вносить свой вклад в изменение радиуса коллайдера. Причём, как будет показано в докладе, относительное изменение частоты прецессии спина мюона как раз определяется относительным

удлинением кольца ускорителя, что заставляет задуматься о возможном влиянии приливных сил на измерения аномального магнитного момента мюона, тем более, что влияние земных приливов на энергию пучка уже наблюдалось на LEP [3].

Литература

1. Lukicov G. The Fermilab Muon (g-2) straw tracking detectors, internal tracker alignment, and the muon EDM measurement // Phys. Rev. L. 2019. V. 2.
2. Brown H.N. et al., Muon (g-2) Collaboration. Precise measurement of the positive muon anomalous magnetic moment // Phys. Rev. L. 2001. V. 86. N. 11
3. Arnaudon L. et al., Effects of terrestrial tides on the LEP beam energy // Nucl. Phys. A 357 (1995) P. 249-252.

УДК 530.145

Дополнительные расходимости пропагаторов на пространствах с горизонтами

Э.Т. Ахмедов^{1,2}, П.А. Анемподистов^{1,2}, К.В. Базаров^{1,2}, Д.В. Дьяконов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова НИЦ «Курчатовский институт»

Рассматривалась теория массивного скалярного поля на фоне пространств Риндлера, де Ситтера и чёрной дыры Шварцшильда. Разложение поля по модам, отвечающим левобегущим и правобегущим волнам

$$\varphi(x) = \sum_i \{a_i \bar{u}_i + b_i \bar{u}_i + h.c.\} \quad (1)$$

Были рассмотрены свойства пропагатора

$$W(x_1, x_2) = \langle \varphi(x_1) \varphi(x_2) \rangle$$

в тепловом состоянии (такие состояния появляются, например, при исследовании вакуумных состояний черных дыр) когда средние от чисел заполнения левобегущих и правобегущих мод были положены равными планковскому распределению с температурой, отличающейся от температуры соответствующих горизонтов:

$$\langle a_p^\dagger a_{p'} \rangle = \frac{\delta(p-p')}{e^{\beta_R p} - 1}, \quad \langle b_p^\dagger b_{p'} \rangle = \frac{\delta(p-p')}{e^{\beta_L p} - 1} \quad (2)$$

Было показано, что для таких состояний пропагатор приобретает дополнительную инфракрасную расходимость при стремлении обеих точек пропагатора к горизонту

$$W(x_1, x_2) \rightarrow \frac{|\lambda|}{\beta} \quad (3)$$

, где $\lambda \rightarrow \infty$; β - обратная температура, зависящая от пространства на фоне которого находится скалярное поле и типа горизонта.

Также было исследовано поведение регуляризованного тензора энергии-импульса (ТЭИ) в такой ситуации. При стремлении к горизонту ТЭИ обращается в ноль

$$\langle :T_{\mu\nu}: \rangle \rightarrow 0$$

в то время как в координатах ТЭИ с одним верхним и одним нижним индексом претерпевает расходимость.

Например, на фоне чёрной дыры Шварцшильда

$$ds^2 = \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) dt^2 - \frac{dr^2}{\left(1 - \frac{r_g}{r}\right)} = C(U, V) dU dV \quad (4)$$

где

$$U = t - r - r_g \log \left(\frac{r}{r_g} - 1 \right), \quad V = t + r + r_g \log \left(\frac{r}{r_g} - 1 \right) \quad (5)$$

ТЭИ при стремлении к горизонту

$$T_V^V = T_U^U = \frac{m^2}{2} \langle \varphi \varphi \rangle \square \frac{m^2}{2\beta} |\lambda| \quad (6)$$

Литература

1. P. Candelas, Vacuum polarization in Schwarzschild spacetime // *Phys. Rev. D* 21, 2185 (1980)

УДК 539.12.01

Исследование нарушений зависящих от времени неравенств Вигнера в системе нейтральных псевдоскалярных мезонов с фоном

А.Ю. Ефимова¹

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Концепция реализма [1], включающая в себя No-signaling in time [2] и концепцию локального реализма [3], вытекает из представлений о классическом мире, однако, эти представления могут не выполняться для квантовых объектов. В рамках квантовой механики могут быть нарушены принцип классического реализма, постулирующий совместное существование наблюдаемых, и принцип локальности. Одним из способов проверки концепции реализма для квантовых объектов является исследование нарушений неравенств Вигнера [4], [8].

Вывод независимых [4] и зависящих [8] от времени неравенств Вигнера предполагает существование трех дихотомных наблюдаемых, а сами неравенства включают в себя вероятности обнаружить пары запутанных частицы в одном из базисных состояний. В качестве таких состояний можно использовать состояния с определенным ароматом, состояния с определенным значением комбинированных зарядовой и пространственной четностей и состояния с определенными массой и временем жизни. Впервые эта идея была реализована в [5]. Теоретические расчеты показали, что существуют нарушающиеся неравенства Вигнера для различных псевдоскалярных мезонов.

После возникновения теоретического обоснования, необходимо экспериментально доказать подобные нарушения. Для этого нужно принять во внимание, что в любом эксперименте существует определенная доля фона, которая может вносить вклад в результаты эксперимента. Поэтому необходимо изучить возможные изменения в теоретических предсказаниях с учетом дополнительного рассмотрения фоновых процессов. Одной из простейших моделей фона является состояние Вернера [6], описываемое матрицей плотности:

$$\hat{\rho}^{(W)} = x |\Psi^- \rangle \langle \Psi^-| + \frac{1-x}{4} \hat{1},$$

где $\hat{1}$ - единичная матрица 4×4 , $0 \leq x \leq 1$ - параметр чистоты системы.

В данной системе фон моделируется при помощи единичного оператора. В состоянии без примесей матрица плотности переходит в проекционный оператор синглетного белловского состояния $|\Psi^- \rangle$.

На основании приведенной выше модели было проведено исследование независимых от времени неравенств Вигнера в системе нейтральных каонов [7], которое показало, что для экспериментального обнаружения нарушений независимых от времени неравенств Вигнера необходимо, чтобы параметр чистоты x превышал 0.996828, то есть нужно практически полностью избавиться от фона, что невозможно в современных экспериментах по физике частиц.

В настоящей работе продолжается исследование неравенств Вигнера для состояния Вернера, но уже рассматривается зависящая от времени версия неравенств [8]:

$$\begin{aligned} & w(a_+^{(2)}, b_+^{(1)}, t) \leq \\ & \leq w(a_+^{(2)}(t_0) \rightarrow a_+^{(2)}(t)) (w(b_+^{(1)}(t_0) \rightarrow b_+^{(1)}(t)) + w(b_-^{(1)}(t_0) \rightarrow b_+^{(1)}(t))) w(a_+^{(2)}, c_+^{(1)}, t_0) + \\ & + w(a_-^{(2)}(t_0) \rightarrow a_+^{(2)}(t)) (w(b_+^{(1)}(t_0) \rightarrow b_+^{(1)}(t)) + w(b_-^{(1)}(t_0) \rightarrow b_+^{(1)}(t))) w(a_-^{(2)}, c_+^{(1)}, t_0) + \\ & + w(b_+^{(1)}(t_0) \rightarrow b_+^{(1)}(t)) (w(a_+^{(2)}(t_0) \rightarrow a_+^{(2)}(t)) + w(a_-^{(2)}(t_0) \rightarrow a_+^{(2)}(t))) w(c_+^{(2)}, b_+^{(1)}, t_0) + \end{aligned} \quad (1)$$

$+ w(b_+^{(1)}(t_0) \rightarrow b_+^{(1)}(t))(w(a_+^{(2)}(t_0) \rightarrow a_+^{(2)}(t)) + w(a_-^{(2)}(t_0) \rightarrow a_+^{(2)}(t)))w(c_+^{(2)}, b_+^{(1)}, t_0)$,
 которая была исследована для чистых состояний в [9]. Вероятности необходимые для проверки неравенства (1) были вычислены для систем K^0 , B_S^0 и D^0 - мезонов.

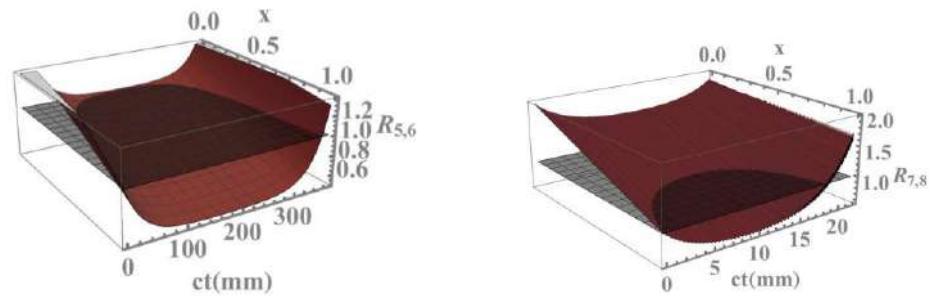


Рис.1 Области нарушения неравенства (2) для B_S^0 и K^0 -мезонов.

Графики иллюстрируют области нарушения ($R_N \leq 1$) и ненарушения ($R_N \geq 1$) неравенства (1) в зависимости от времени ct и параметра чистоты x для B_S^0 в случае $\{a_+, b_+, c_+\} \rightarrow \{M_2, M, M_L\}$ и для K^0 -мезонов в случае $\{a_+, b_+, c_+\} \rightarrow \{M_1, M, M_L\}$, для которых были обнаружены соответствующие нарушения при рассмотрении чистого состояния в [9].

В результате данной работы были обнаружены области нарушения неравенств (1) в зависимости от $x(ct)$ и показано, что для зависящих от времени неравенств Вигнера нарушения могут быть обнаружены при заметной примеси фона, значительно большей, чем для независящих от времени неравенств.

Литература

1. N. Nikitin and K. Toms Wigner inequalities for testing the hypothesis of realism and concepts of macroscopic and local realism // Phys. Rev. A 100, 062314 (2019).
2. J. Kofler and C. Brukner Condition for macroscopic realism beyond the Leggett-Garg inequalities // Phys. Rev. A 87, 052115 (2013).
3. A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete? // Phys. Rev. 47, 777 (1935).
4. E. P. Wigner On Hidden Variables and Quantum Mechanical Probabilities // Am. J. Phys. 38, 1005 (1970).
5. F. Uchiyama Generalized Bell inequality in two neutral kaon systems // Phys. Lett. A 231, 295 (1997).
6. R. F. Werner Quantum states with Einstein-Podolsky-Rosen correlations admitting a hidden-variable model // Phys. Rev. A 40, 4277–4281 (1989).
7. A. Efimova Problems with experimental observation of violation of Wigner inequalities in a system of neutral kaons // J. Phys. Conf. Ser. 1439, 012008 (2020).
8. N. Nikitin, V. Sotnikov and K. Toms Time-dependent Bell inequalities in a Wigner form // Phys. Rev. A 90, 042124 (2014).
9. N. Nikitin, V. Sotnikov and K. Toms Proposal for experimental test of the time-dependent Wigner inequalities for neutral pseudoscalar meson systems // Phys. Rev. D 92, 016008 (2015).

УДК 530.1

Исследование различных граничных условий в решеточной глюодинамике

Д.А. Сычев

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время квантовая хромодинамика (КХД) является основной теорией, описывающей сильные взаимодействия. В это же время точные теоретические расчеты зачастую бывают затруднены неприменимостью пертурбативных техник из-за отсутствия малой константы связи. В этих случаях зачастую численный ответ помогает получить компьютерное моделирование. В настоящее время широко используются алгоритмы Монте-Карло, изначально возникшие в статистической физике, ввиду схожести постановки некоторых задач статистической физики и задач квантовой теории поля в формализме функционального интеграла в евклидовом времени.

Из-за бесконечномерности пространства полевых конфигураций, их прямое моделирование затруднительно, поэтому применяется дискретизация пространства-времени решеткой конечных

размеров. Для получения результатов, близких к реальному эксперименту, требуется брать непрерывный предел решеточных теорий. Поэтому, ввиду большой вычислительной сложности этой задачи, желательным является использование производительных вычислительных систем и специально оптимизированных алгоритмов.

В частности, так как физическое пространство не имеет края, а для моделирования используется решетка конечных размеров, то встает вопрос о выборе граничных условий. Традиционно используются периодические граничные условия (ГУ) [1, 2]. На получающемся многообразии (четырёхмерном торе) все точки эквивалентны. В это же время на торе в непрерывной теории могут возникать конфигурации с разной топологической структурой, вследствие чего возникает проблема “топологического замерзания” на решетках больших размеров. А именно, пространство конфигураций полей непрерывной теории, как и теории с периодическими ГУ, разбивается на счетное число классов (топологических секторов), соответствующих целым значениям топологического заряда, определяемого как интеграл по пространственно-временному многообразию M от плотности топологического заряда:

$$Q = \int_M d^4x q(x)$$

(В КХД $q(x) = \frac{1}{32\pi^2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \text{Tr}(F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma})$) При этом в ходе Монте-Карло моделирования переходы между разными топологическими секторами подавлены, в результате чего автокорреляционное время, связанное с топологическим зарядом, быстро возрастает с ростом размера решетки, что негативно сказывается на погрешностях измерений. Также для некоторых задач используются открытые ГУ [3].

В работе [4] был предложен еще один вариант граничных условий, так, во временном направлении:

$$U_x(x, y, z, t + T) = U_x^\dagger(L - x - 1, y, z, t) \\ U_i(x, y, z, t + T) = U_i(L - x, y, z, t)$$

(а в пространственных направлениях решетки используются периодические ГУ). При этом возникает неориентируемое однородное многообразие. Привлекательность этого метода связана с тем, что возникает ускорение работы алгоритма за счет уменьшения автокорреляций, так как с этими ГУ на получающемся неориентируемом многообразии топологический заряд может принимать любые вещественные значения, что облегчает переходы между конфигурациями с разными значениями топологического заряда. Однако, так как это все же другая постановка задачи, то необходимо убедиться, что этот метод воспроизводит результаты, полученные с использованием других ГУ. В исходной работе [4] было проверено согласование для нескольких наблюдаемых в теории с фермионами. В данной же работе было проведено сравнение для некоторых наблюдаемых в чистой глюодинамике, то есть теории без фермионов.

В частности, с обоими вариантами граничных условий для теорий с калибровочными группами $SU(2)$ и $SU(3)$ были произведены измерения (для различных решеточных значений константы связи) средних значений петель Вильсона различных размеров во всевозможных ориентациях на решетках размерами 16^4 и 12^4 соответственно. Как и ожидалось, для периодических ГУ в рамках погрешностей измерений не было выявлено зависимости среднего значения от ориентации, а для «перекрученных» граничных условий же (так как направления X и T выделены, тогда как Y и Z эквивалентны) на решетке меньшего размера 6^4 (при этом ошибки дискретизации больше, чем на решетках больших размеров, что облегчает обнаружение анизотропии), например, для петли размером 1×1 была обнаружена зависимость среднего значения от ориентации петли. При этом эффект анизотропии даже на решетке 6^4 был небольшим, более чем на порядок уступающим зависимости среднего значения петли от её размера, поэтому для дальнейшего использования для расчета производных наблюдаемых использовались усредненные также и по ориентациям значения петель соответствующих размеров. Через значения петель Вильсона были выражены также отношения Кройца, при этом в рамках ошибок измерений не было обнаружено их зависимости от граничных условий.

Также, путем экстраполяции поведения петель Вильсона большого размера было оценено значение натяжения межкварковой струны в фазе конфайнмента. Опять же, не было выявлено зависимости от граничных условий. Стоит отметить, что так как вычисления для различных ГУ проводились при одинаковых значениях константы связи в решеточных единицах, то так как значение натяжения струны является фиксированной физической наблюдаемой, то это означает независимость шага решетки, выраженного в физических единицах, от граничных условий.

Также были найдены значения межкваркового потенциала на расстояниях в несколько единиц шага решетки. А так как на измерении межкваркового потенциала основан еще один метод установления физического значения шага решетки (через параметр Зоммера). То, соответственно, выявленное совпадение (в рамках погрешности измерений) межкварковых потенциалов при различных ГУ показывает еще раз независимость шага решетки от граничных условий.

В заключение, было проведено измерение массы скалярного глюбола с использованием многоуровневого алгоритма [5] путем оценки скорости затухания корреляций скалярной наблюдаемой. Как и для упомянутых ранее наблюдаемых, не было ее выявлено зависимости от граничных условий. В дополнение к этому, для массы скалярного глюбола была проведена экстраполяция на непрерывный предел (с использованием данных о параметре Зоммера [6]) и получена согласованность (в рамках ошибок) с результатами, полученными с использованием анизотропных решеток [7].

Литература

1. Кройц М. Кварки, глюоны и решетки : пер. с англ. - Москва: Мир, 1987.
2. Gattringer C., Lang C.B., Quantum Chromodynamics on the Lattice, Springer Science & Business Media, 2009
3. Chowdhury A., Harindranath A., Maiti J., Open Boundary Condition, Wilson Flow and the Scalar Glueball Mass, arXiv:1402.7138 [hep-lat]
4. Mages S., Toth B.C., Borsanyi S., Fodor Z., Katz S.D., Szabo K.K., Lattice QCD on Non-Orientable Manifolds, arXiv:1512.06804 [hep-lat]
5. Mondal S., Majumdar P., Mathur N., Light Glueball masses using the Multilevel Algorithm, arXiv:1411.3503 [hep-lat]
6. Guagnelli M., Sommer R., Wittig H., Precision computation of a low-energy reference scale in quenched lattice QCD, arXiv:hep-lat/9806005
7. Morningstar C.J., Peardon M., The glueball spectrum from an anisotropic lattice study, arXiv:hep-lat/9901004

УДК 530.1

Ток фермионов на фоне постоянного внешнего электрического поля

Д.И. Садеков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Известным явлением в квантовой теории поля является то, что наличие сильных фоновых полей приводит к неравновесному состоянию в теории, если возможно рождение частиц. Это наблюдается в различных физических системах: например, в расширяющемся пространстве-времени де Ситтера [1, 2], на фоне внешнего электрического поля [3, 4] и других ситуациях [5, 6]. В таких задачах интересно изучить динамику состояния системы, в частности, эволюцию заселённости энергетических уровней и аномального квантового среднего. При этом для решения такой задачи необходимо пользоваться диаграммой техники Швингера-Келдыша, так как фейнмановская техника неприменима в нестационарных ситуациях [2-8]. Можно поставить и другой вопрос, требующий исследования - вопрос о выборе начального состояния теории.

В данной работе зависимость от начального состояния исследуется на примере тока фермионов на фоне постоянного внешнего электрического поля. Именно, рассматриваем теорию с действием:

$$S = \int d^4x \left[-\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \bar{\psi} (i\gamma^\mu D_\mu - m) \psi - j^{\mu,cl} A_\mu \right],$$

где

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu, \quad D_\mu = \partial_\mu + ieA_\mu$$

Кроме того, для классического фонового поля выбрана темпоральная калибровка:

$$A_\mu^{cl} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ A_3 \end{pmatrix}, \quad A_3 = eEt$$

Далее выявляются решения уравнения Дирака для четырёх-компонентных фермионов в данной теории, после чего с помощью этих решений квантуется поле Дирака. Важно отметить, что явным образом мы выделяем моды, удовлетворяющие корректному адамарову поведению, то есть такие моды, которые на больших энергиях переходят в плоские положительно-частотные (или отрицательно-частотные) гармоники. Это условие необходимо для того, чтобы ультрафиолетовые перенормировки не зависели от внешнего поля в лидирующем порядке.

После этих вычислений мы находим выражение для древесного тока

$$\langle J^3 \rangle_{\text{tree}} = -4 \lim_{\Lambda \rightarrow +\infty} \Lambda \int \frac{d^2 p_{\perp}}{(2\pi)^3} \left[\frac{e^{-\pi \frac{m^2 + |p_{\perp}|^2}{eE}} (|\alpha|^2 + |\beta|^2 + 2\text{Re}(\alpha^* \beta) e^{\pi \frac{m^2 + |p_{\perp}|^2}{2eE}})}{|\alpha|^2 + |\beta|^2 + 2\text{Re}(\alpha^* \beta) e^{-\pi \frac{m^2 + |p_{\perp}|^2}{2eE}}} \right],$$

которое и является основным результатом проделанной работы, так как определяет зависимость этой физической величины от коэффициентов α , β , которыми параметризуется выбранное начальное состояние.

Результаты работы сравниваются с результатами, полученными для теории с бозонами. Также обсуждается ещё более общий выбор состояний с помощью обобщенных коэффициентов Боголюбова. Многие аспекты исследуемой темы подробно обсуждены также в статьях С.П. Гаврилова и Д.М. Гитмана [7-12].

Литература

1. D. Krotov and A. M. Polyakov, "Infrared Sensitivity of Unstable Vacua," Nucl. Phys. B 849, 410 (2011).
2. E. Akhmedov, U. Moschella and F. Popov, "Characters of different secular effects in various patches of de Sitter space," Phys. Rev. D 99, no.8, 086009 (2019).
3. E. T. Akhmedov, N. Astrakhantsev and F. K. Popov, "Secularly growing loop corrections in strong electric fields", JHEP 1409, 071 (2014).
4. E. T. Akhmedov and F. K. Popov, "A few more comments on secularly growing loop corrections in strong electric fields", JHEP 1509, 085 (2015).
5. E. T. Akhmedov, E. N. Lanina and D. A. Trunin, "Quantization in background scalar fields", Phys. Rev. D 101, no. 2, 025005 (2020).
6. E. Akhmedov and S. Alexeev, "Dynamical Casimir effect and loop corrections", Phys. Rev. D.
7. S.P. Gavrilov and D.M. Gitman, "One-loop energy-momentum tensor in QED with electric-like background", Phys. Rev. D, 78, 045017 (2008).
8. S.P. Gavrilov, D.M. Gitman and N. Yokomizo, "Dirac fermions in strong electric field and quantum transport in graphene", Phys. Rev. D, 86, 125022 (2012).
9. S.P. Gavrilov and D.M. Gitman, "Scattering and pair creation by a constant electric field between two capacitor plates", Phys. Rev. D, 93, no.4, 045033 (2016).
10. Gavrilov, S.P. and Gitman, D.M., "Vacuum instability in external fields", Phys. Rev. D, 53, 7162--7175, 1996.
11. Gavrilov, S.P. and Gitman, D.M., "Consistency restrictions on maximal electric field strength in QFT", Phys. Rev. Lett., 101, 130403, 2008.
12. Gavrilov, S.P., "Effective energy-momentum tensor of strong-field QED with unstable vacuum", J. Phys. A, 39, 6407--6413, 2006.

УДК 538.915

Кинетика фотолюминесценции для квантовой ямы InGaAs/GaAs с дельта-слоем Mn

К.С. Кабаев

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского

Построена теоретическая модель кинетики фотолюминесценции в системе фотогенерируемых дырок в квантовой яме с ионами в монослое Mn вблизи квантовой ямы, проходящая под воздействием циркулярно-поляризованного излучения импульсного лазера. Дырки и электроны рождаются в квантовой яме InGaAs, а ионы Mn содержатся в дельта-слое Mn, на барьере GaAs вблизи ямы. Модель основана на данных экспериментов, которые показывают, что взаимодействие между носителями и ионами Mn описывается характерной спин-поляризованной фотолюминесценцией с зависимостью времени затухания фотолюминесценции от расстояния между взаимодействующими частицами. Использование последующего импульсного лазерного возбуждения с противоположной

круговой поляризацией демонстрирует пониженную степень поляризации излучения квантовой ямы для образцов, в которых наблюдается сильное магнитное взаимодействие. Результаты расчётов демонстрируют, что ионы Mn действуют как спиновая память, которыми можно оптически управлять с помощью поляризации фотогенерируемых носителей. Запись и оптическое считывание спина ионов Mn в магнитных полупроводниках является важной задачей для практических приложений.

Для решения данной задачи был выбран подход с построением кинетических уравнений, который включает в себя уравнения баланса в неравновесной среде, который использовался в аналогичных задачах [2,3]. Система кинетических уравнений должна учитывать следующие процессы: генерация пары «электрон-дырка» при поглощении фотона в процессе облучения импульсом лазера, рекомбинация пары «электрон-дырка с испусканием фотона соответствующей поляризации, спиновая релаксация электронов, дырок и ионов марганца, для дырок описывается взаимодействием со слоем марганца, аналогично описывается взаимодействие слоя марганца с дырками.

Предлагаемая модель представляет собой систему дифференциальных уравнений, описывающих баланс во времени для концентраций в системе «квантовая яма + дельта слой марганца» из шести компонент: 1 - Электроны со спином $(-1/2)$ Ne1 в КЯ; 2 - Электроны со спином $(1/2)$ Ne2 в КЯ; 3 - Дырки со спином $(-3/2)$ Nh1 в КЯ; 4 - Дырки со спином $(3/2)$ Nh2 в КЯ; 5 - Атомы марганца со спином вниз Nmn1 в дельта-слое Mn; 6 - Атомы марганца со спином вверх Nmn2 в дельта-слое Mn. В наиболее простой форме система кинетических уравнений имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dN_{e1}}{dt} = A \cdot \sigma_2(t) - B \cdot \min\{N_{e1}, N_{h2}\} - \gamma_e \cdot (N_{e1} - N_{e2}) \\ \frac{dN_{e2}}{dt} = A \cdot \sigma_1(t) - B \cdot \min\{N_{e2}, N_{h1}\} - \gamma_e \cdot (N_{e2} - N_{e1}) \\ \frac{dN_{h1}}{dt} = A \cdot \sigma_1(t) + C \cdot (N_{Mn1} - N_{Mn2}) - B \cdot \min\{N_{e2}, N_{h1}\} - \gamma_h \cdot (N_{h1} - N_{h2}) \\ \frac{dN_{h2}}{dt} = A \cdot \sigma_2(t) + C \cdot (N_{Mn2} - N_{Mn1}) - B \cdot \min\{N_{e1}, N_{h2}\} - \gamma_h \cdot (N_{h2} - N_{h1}) \\ \frac{dN_{Mn1}}{dt} = D \cdot (N_{h1} - N_{h2}) - \gamma_{Mn} \cdot (N_{Mn1} - N_{Mn2}) \\ \frac{dN_{Mn2}}{dt} = D \cdot (N_{h2} - N_{h1}) - \gamma_{Mn} \cdot (N_{Mn2} - N_{Mn1}) \end{cases}, \quad (1)$$

Источник лазерных импульсов описывается функциями $\sigma_{1,2}(t)$, Параметр А по порядку величины пропорционален мощности лазера (выбранной в численных расчётах за единицу) и обратному времени зажигания люминесценции, которое можно оценить по экспериментальным графикам [1]. Второй член в первом и втором уравнениях системы, а также третий член в третьем и четвёртом уравнении, имеющий вид $-B \cdot \min\{N_{e1}, N_{h2}\}$, описывает рекомбинацию пары «электрон-дырка» с испусканием фотона соответствующей поляризации. Слагаемые, описывающие спиновую релаксацию, во всех уравнениях системы (1) имеют вид $-\gamma_e(N_{e1} - N_{e2})$, где $\gamma_{e,h,Mn}$ есть скорость релаксации спина для электронов, дырок и атомов марганца соответственно. Взаимодействие дырок с атомами марганца описывается слагаемыми вида $C \cdot (N_{Mn1} - N_{Mn2})$ в третьем и четвёртом уравнениях системы (1). Динамика поляризации атомов марганца зависит, во-первых, от взаимодействия с дырками, что отражено в первом слагаемом в уравнениях № 5 и 6. Параметр D определяет скорость перемагничивания атомов марганца и зависит от интенсивности этого взаимодействия. По экспериментальным данным он равен или даже превосходит скорость релаксации дырок γ_h .

Начальные условия, соответствующие начальной концентрации ионов марганца: $N_{Mn1}(0) = N_{Mn2}(0)$, где $N_{Mn1}(0) + N_{Mn2}(0) = N_{Mn} = 1$; Для электронов ямы InGaAs: $N_{e1}(0) = N_{e2}(0)$, где $N_{e1}(0) + N_{e2}(0) = N_e(0)$, что по экспериментальным оценкам, удовлетворяет неравенству $N_e(0) \ll N_{Mn}$; И дырок: $N_{h1}(0) = N_{h2}(0) = 0$.

Ниже будут представлены результаты численного решения системы (1) методом Рунге-Кутты для определенных значений параметров, обеспечивающих наилучшее согласие с экспериментальными графиками (результаты экспериментов их авторы планируют опубликовать позднее).

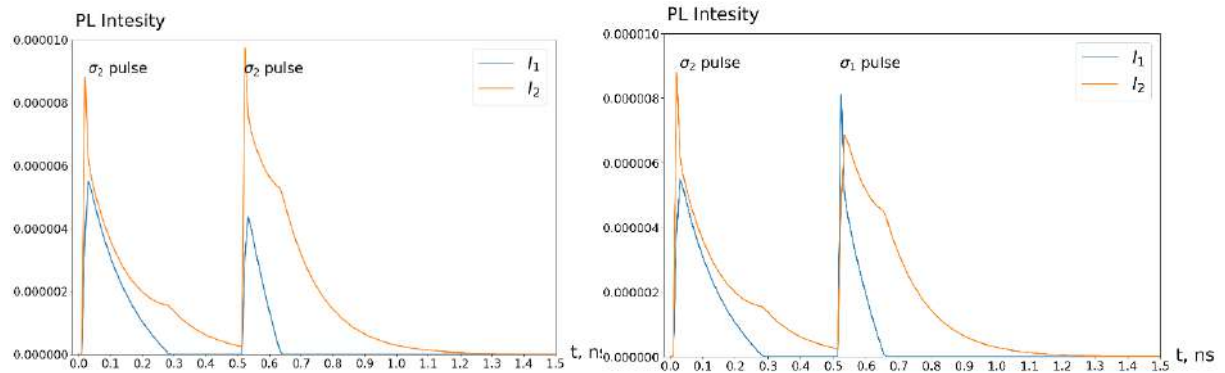


Рис.1. Зависимость от времени интенсивности фотолюминесценции для случая двух одинаковых импульсов лазера с поляризациями σ_2 , σ_2 слева и σ_2 , σ_1 справа.

Из полученных зависимостей интенсивности люминесценции согласно формуле (3) можно определить поляризацию излучения.

$$P = \frac{I_{\sigma_2} - I_{\sigma_1}}{I_{\sigma_2} + I_{\sigma_1}}, \quad (2)$$

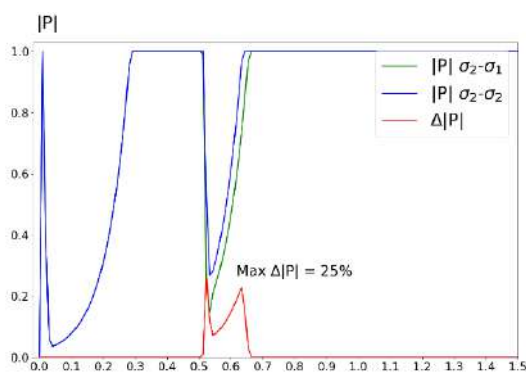


Рис.3. Модуль поляризации фотолюминесценции для одинаковых импульсов лазера (синяя кривая) и для разных импульсов (зелёная кривая), совместно с графиком разности модуля поляризации (красная кривая).

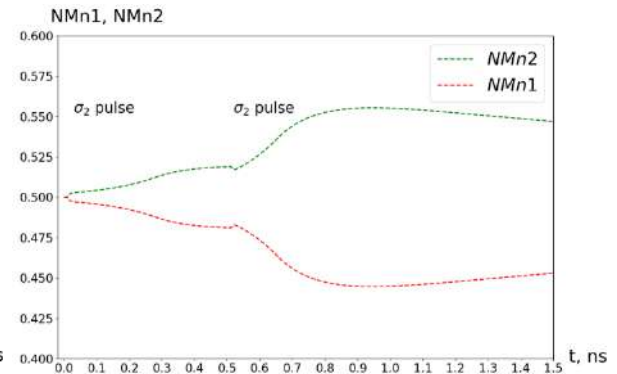


Рис.4. Концентрация атомов марганца со спином вниз (зелёная линия) и со спином вверх (бордовая линия). Сумма концентраций равна начальной концентрации $N_{Mn}(0)=1$.

Литература

1. M.A.G. Balanta, M.J.S.P. Brasil, F. Iikawa, et al, Phys. Rep. V.6 p.24537 (2016).
2. T.S. Shamirzaev, J. Debus, D.R. Yakovlev, et al, Phys. Rev. B V.94 p.045411 (2016).
3. T.S. Shamirzaev, J. Rauter, D.R. Yakovlev, et al, Phys. Rev. B V.96 p.035302 (2017).

УДК 530.145.81

Нестандартные двоичные представления координаты и импульса в квантовой механике

М.Г. Иванов, А.Ю. Полушкин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В ходе исследования троичных систем счисления [1] мы обратили внимание на тот факт, что для двоичной системы счисления возможна не только двоичная несимметричная с цифрами $\{0,1\}$, подробно исследованная в [2], но и симметричная двоичная система с цифрами $\{\pm 1/2\}$. Данная система счисления соответствовала антисимметричным граничным условиям координатной решётки, что соответствует движению заряженной частицы по кольцу с магнитным потоком $\frac{\Phi_0}{2}$ [3]. В

связи с этим мы решили рассмотреть вопрос, какие системы счисления окажутся естественными для описания движения заряженной частицы на кольце с произвольным магнитным потоком Φ .

В роли цифр в данной работе выступают эрмитовы операторы с собственными числами d_1 и $d_2 = d_1 + 1$. Для операторов цифр импульса построено разложение по координатным сдвигам (разложение Фурье). Исследовано влияние цифры d_1 на положение узлов решётки и граничные условия.

Пусть координатная и импульсная решётки содержат $N = 2^n$ узлов, шаг координатной решётки $\Delta x = 2^{-n_-}$, шаг импульсной решётки $\Delta p = 2^{-n_+}$, $n = n_+ + n_-$. Оператор импульса определим как генератор сдвига: $\hat{T}_a = e^{2\pi i a \hat{p}}$. Отметим, что из этого определения следует, что $\hbar = \frac{1}{2\pi}$, $h = 1$. Число x мы представляем в виде ряда $x = \sum_{s=-n_-}^{n_+-1} \mathbf{b}(s, x) 2^s \pmod{2^{n_+}}$.

Рассмотрим влияние выбора значения цифры d_1 на решётку. Для этого сначала рассмотрим следующее число:

$$d_1 \dots d_1, d_1 \dots d_1 = \sum_{s=-n_-}^{n_+-1} 2^s d_1 = d_1 (2^{n_+} - 2^{-n_-}). \quad (1)$$

Сразу же имеет смысл ввести процедуру перенормировки, аналогичную введённой в [1],[2], в соответствии с правилом:

$$x' = 2x - x = \sum_{s=-n_-}^{n_+-1} (\mathbf{b}(s-1, x) - \mathbf{b}(s, x)) 2^s = \sum_{s=-n_-}^{n_+-1} 2^s d_1 = -d_1 \Delta x. \quad (2)$$

Число (1), перенормированное в соответствии с правилом (2), в некотором смысле, задаёт положение нулевого узла решётки при замене $0 \rightarrow d_1, 1 \rightarrow d_1 + 1$. В случае $d_1 \in (0; 1)$, происходит сдвиг узлов решётки друг относительно друга, при добавлении целой части, помимо этого, происходит сдвиг нулевого узла решётки.

Теперь мы можем явно записать разложение цифры импульса номер r по координатным сдвигам:

$$\mathbf{b}(r, p) = \frac{2d_1 + 1}{2} + \Delta p 2^{-r} \sum_{D \in \mathbb{Z}_{2^r} \frac{\Delta p}{\Delta p}} \frac{\hat{T}_{-A}}{2i \sin(\pi i \Delta p A)} \exp(-\pi i \Delta p A (2d_1 + 1)), A = 2^{-r} \left(D + \frac{1}{2}\right). \quad (3)$$

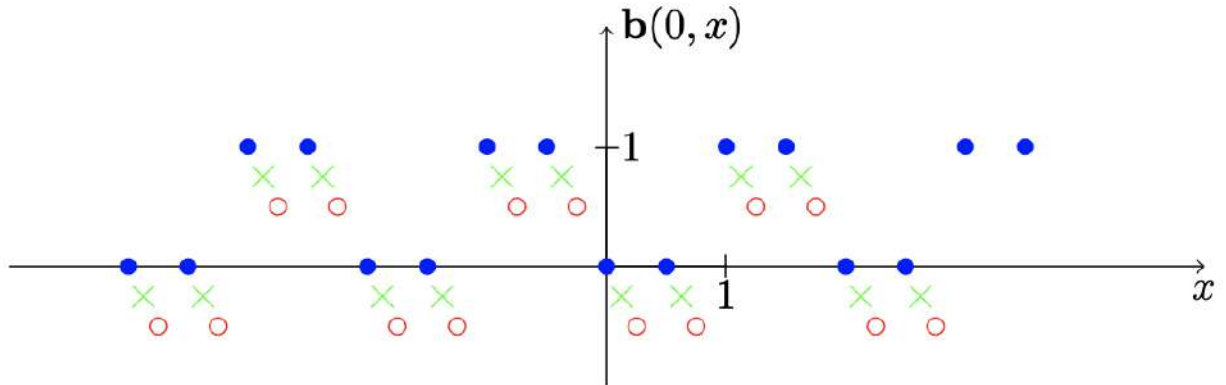


Рис.1 График цифры номер 0 координаты для $d_1 = -1/2$ (красные незакрашенные круги), для $d_1 = -1/4$ (зелёные кресты), для $d_1 = 0$ («несмещённая решётка», синие закрашенные круги) при $n_- = 1, \Delta x = 1/2$.

Из (3) мы можем сделать вывод, что сдвиг импульсной решётки индуцирует следующие граничные условия в координатном представлении:

$$\psi(x + 2^{n_+}) = e^{-2\pi i d_1} \psi(x). \quad (4)$$

То есть оператор циклического сдвига имеет следующий вид:

$$\hat{T}_{\Delta x} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & e^{-i\varphi} \\ 1 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & 1 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi = 2\pi d_1. \quad (5)$$

Теперь рассмотрим заряженную частицу на кольце длины a , через которое есть магнитный поток Φ . Калибровочным преобразованием мы можем занулить векторный потенциал на кольце, в этом случае мы имеем задачу об одномерном движении свободной частицы с граничными условиями

$$\psi(x+a) = e^{-2\pi i \frac{\Phi}{\Phi_0}} \psi(x). \quad (6)$$

Таким образом, сдвигу (обобщенного) импульса соответствует изменение граничных условий для координаты (6). Эта ситуация аналогична тому, что мы наблюдаем для (4). Сравнивая выражения (4) и (6) мы можем заключить, что для описания движения заряженной частицы на кольце с произвольным магнитным потоком Φ оказывается в некотором смысле естественной системе

$$d_1 = \frac{\Phi}{\Phi_0}. \quad (7)$$

Литература

1. M.G. Ivanov, A. Yu. Polushkin Ternary and Binary Representation of Coordinate and Momentum in Quantum Mechanics // arxiv:quant-ph/2009.13618
2. Иванов М.Г. Двоичное представление координаты и импульса в квантовой механике // Теоретическая и Математическая Физика, 2018 Т.196, №1 С. 70-87.
3. G.S. Beloglazov et al., "Mathematical Physics: Problems and Solutions"// Ser. "Modern Problems of Mathematical Physics", 2010, Spec. Iss. No 3: 42-44
4. Иванов М.Г. Как понимать квантовую механику, РХД, М., Ижевск, 2015. 552 с.

УДК 530.145

Об эквивалентности двух конструкций Зеркальной симметрии

Б.А. Еремин^{1,2,3,4}, А.А. Белавин^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН

³Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича РАН

⁴Сколковский институт науки и технологий

Мы показали [1] эквивалентность конструкций зеркальной симметрии Батырева [2] и Берг-лунда-Хубша-Кравитца [3-4] для орбифолдов Калаби-Яу во взвешенном проективном пространстве. Орбифолд определен как фактор гиперповерхности X_M по некоторой допустимой подгруппе G фазовой симметрии X_M . Сама гиперповерхность задается нулями обратимого квази-однородного полинома W_M .

Зеркальная симметрия дает глубокую геометрическую связь между парой алгебраических многообразий, и изучается десятилетиями. Для пары многообразий Калаби-Яу (X, Y) , согласно Зеркальной симметрии, существует изоморфизм когомологий

$$H^{(p,q)}(X) = H^{(3-p,q)}(Y)$$

Согласно конструкции Берглунда-Хубша-Кравица (БХК), зеркальное партнер для орби-фолда X_M/G задается в другом взвешенном проективном пространстве как фактор по некоторой дуальной подгруппе G^T фазовых симметрий гиперповерхности X_M^T . А именно, пусть полное семейство орбифолда X_M/G задается нулями деформированного полинома W . Обозначим показатели степеней деформаций как S_{ij} . Тогда семейство зеркального орбифолда X_M^T/G^T задается деформированным полиномом W^T . Показатели степеней деформаций в этом случае обозначим как R_{mj} . Тогда из конструкции БХК следует, что спаривание $B_{ij}S_{ij}R_{mj}$ должно быть целочисленным. Этим и определяется зеркальное семейство.

Конструкция Батырева предполагает, что зеркальное многообразие Y к исходному орби-фолду задается как гиперповерхность в торическом многообразии T . Показатели степеней мономов полинома W определяют пятимерные вектора V_a в количестве $h_X + 5$, где h_X число Ходжа исходного многообразия. Эти вектора задают рефлексивный многогранник Батырева. С другой стороны, по ним определяется веер, который задает торическое многообразие T . Мы находим полином W^Y в торических координатах, который задает зеркало Y уравнением $W^Y = 0$. Также мы строим отображение из торического многообразия в фактор взвешенного проективного пространства. В проективных координатах полином W^Y совпадает с предсказанным конструкцией БХК зеркальным полиномом W^T .

Таким образом, показана эквивалентность двух конструкций зеркальной симметрии для орби-фолдов Калаби-Яу типа Берглунда-Хубша во взвешенном проективном пространстве.

Литература

1. *Belavin A. and Eremin B.* On the equivalence of Batyrev and BHK Mirror symmetry constructions// arXiv e-print 2010.07687
2. *Batyrev V. V.* Dual polyhedra and mirror symmetry for Calabi-Yau hypersurfaces in toric varieties // J. Alg. Geom., 3(1994):493–545.
3. *Berglund P. and Hubsch T.* A Generalized construction of mirror manifolds // AMS/IP Stud. Adv. Math. 9, 327–346 (1998)
4. *Krawitz M.* FJRW rings and Landau-Ginzburg Mirror Symmetry // arXiv e-print: 0906.0796 [math.AG]

УДК 539.1.01

Поведение дикварков в плотной и горячей ядерной материи

Г.В. Папоян¹

¹Университет "Дубна"

В работе представлена модель для исследования поведения дикварков в плотной и горячей ядерной материи.

Для описания свойств дикварков используется «SV(3)» Намбу-Иона-Лазинио [1] с петлей Полякова [3]. Представлены вычисления поляризационных операторов с помощью программы аналитических вычислений «Form» [4]. Результаты аналитических вычислений имплементируются в код численных вычислений, написанный на «FORTRAN».

Показано поведение физических характеристик для дикварков, как функций температуры ядерной материи. Результаты исследований будут использоваться для планируемого эксперимента «NICA» в Объединенном Институте Ядерных Исследований (г. Дубна).

Литература

1. *S.P. Klevansky*, The Nambu-Jona-Lasinio model of quantum chromodynamics, Rev. Mod. Phys., vol. 64, p. 649, 1992. doi =10.1103/RevModPhys.64.649.
2. *D. Ebert, Yu.L. Kalinovsky, L. Munchow, M.K. Volkov*, Mesons and diquarks in a NJL model at finite temperature and chemical potential, Int.J. Mod. Phys. A, vol. 8, p. 1295, 1993, doi = 10.1142/S0217751X93000539.
3. *Yu. L. Kalinovsky, V. D. Toneev, and A. V. Friesen*, "Phase diagram of baryon matter in the SU(2) Nambu – Jona-Lasinio model with a Polyakov loop," Phys. Usp., vol. 59, no. 4, pp. 367–382, 2016. DOI:10.3367/UFNe.0186.201604b.0387. E.Quack, P. Zhuang, Yu. L. Kalinovsky, S. P. Klevansky, J. Hufner, scattering lengths at finite temperature, Physics Letters B., vol. 348, p. 1, 1995.
4. *V. Jos.* (1989). "FORM (symbolic manipulation system)," [Online] Available: <https://www.nikhef.nl/~form/>.
5. *T. Hahn and M. Perez-Victoria*, "Automatized one loop calculations in four-dimensions and D-dimensions," Comput. Phys. Commun., vol. 118, pp. 153–165, 1999. DOI: 10.1016/S0010-4655(98)00173-8. arXiv:hep-ph/9807565.
6. *R. Mertig, M. Bohm, and A. Denner*, "FEYN CALC: Computer algebraic calculation of Feynman amplitudes," Comput. Phys. Commun., vol. 64, pp. 345–359, 1991. DOI: 10.1016/0010-4655(91)90130-D.

УДК 519.872, 519.217

Применение средств компьютерной алгебры к вычислению амплитуды $\pi\pi$ -рассеяния

Л.И. Голяткина^{1,2}, Е.Д. Рогожина^{1,2}

¹Объединённый институт ядерных исследований

²Университет "Дубна"

В данной работе рассматривается амплитуда процессов рассеяния мезонов, характерная для эффективных моделей КХД. Одной из простейших эффективных теорий КХД является модель Намбу-Иона-Лазинио [1], Лагранжиан которой для случая с двумя ароматами кварков имеет вид:

$$L_{\text{NJL}} = \bar{q} \left(i \gamma_{\mu} \partial^{\mu} - \hat{m}_0 \right) q + G \left[(\bar{q}q)^2 + (\bar{q}i\gamma_5 \vec{\tau} q)^2 \right], \quad (1)$$

где G - константа связи размерности $[\text{ГэВ}^{-2}]$, $\bar{q}, q$ - поля кварков, $\hat{m}_0$ - диагональная матрица токовых масс кварков, $\hat{m}_0 = \text{diag}(m_u^0, m_d^0)$ а $m_u^0 = m_d^0 = m_0$ с $\vec{\tau}$ - матрицы Паули, $\tau^a (a=1, 2, 3)$.

В наиболее общем виде в приближении среднего поля масса кварка в модели НИЛ определяется уравнением Швингера-Дайсона, в массы мезонов определяются уравнением Бете-Солпетера в приближении случайных фаз. Однако, в этой работе опускается исследование зависимости масс от температуры (в виду особенностей пространственной регуляризации и выбранного метода вычисления интегралов), поэтому для простоты используется параметризация, предложенная в работе [2]. Выражения связывающие массы кварков, мезонов и константы взаимодействия можно записать как:

$$M_s^2 = M_\pi^2 Z + 4m^2, \quad (2)$$

$$Z = 1 - 6 \frac{m^2}{M_{a_1}^2}, \quad (3)$$

$$g_{\sigma qq} = g_{\pi qq} \sqrt{Z}, \quad (4)$$

где $M_{a_1} = 1.2 \text{ ГэВ}$ - масса a_1 - мезона, $M_\pi = 0.14 \text{ ГэВ}$, m - динамическая масса кварков.

В однопетлевом приближении амплитуда рассеяния пиона на пионе представляется двумя типами диаграмм: четырех-вершинными "box"-диаграммами и диаграммами, описывающими рассеяние пиона на пионе с образованием промежуточного мезона [3, 4]. Ряд четырех-вершинных диаграмм представлен на Рис.1. Здесь P_1, P_2 - импульсы сталкивающихся частиц, P_3, P_4 - импульсы вылетающих частиц, k - внутренний импульс, по которому происходит интегрирование.

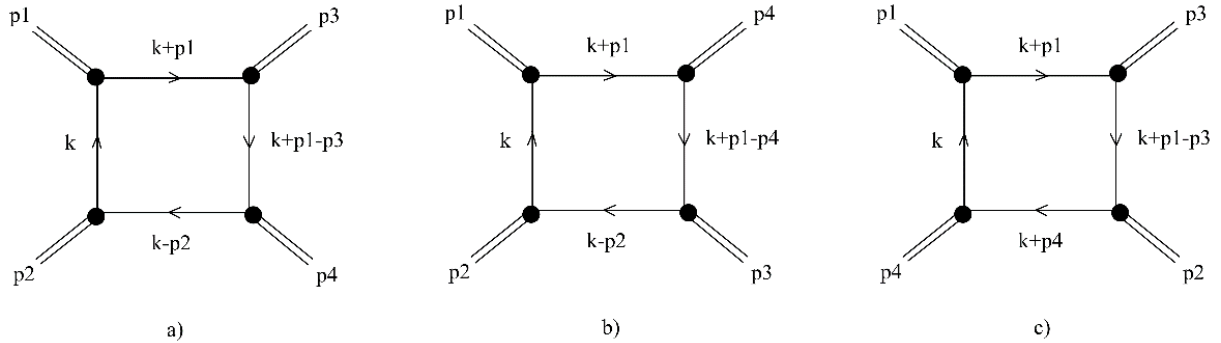


Рис. 12. "Вох"-диаграммы Феймана для $\pi\pi$ -рассеяния.

Вклад каждой из диаграмм на Рис. 1 в общем виде записывается как:

$$iT = -g_{\pi qq}^4 \mu^{2\tau} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{\text{Tr}\{\gamma_5(q_1 + m)\gamma_5(q_2 + m)\gamma_5(q_3 + m)\gamma_5(q_4 + m)\}}{[q_1^2 - m^2][q_2^2 - m^2][q_3^2 - m^2][q_4^2 - m^2]}. \quad (5)$$

Литература

1. S.P. Klevansky, The Nambu-Jona-Lasinio model of quantum chromodynamics, Rev. Mod. Phys., vol. 64, p. 649, 1992. doi =10.1103/RevModPhys.64.649.
2. D. Ebert, Yu.L. Kalinovsky, L. Munchow, M.K. Volkov, Mesons and quarks in a NJL model at finite temperature and chemical potential, Int.J. Mod. Phys. A, vol. 8, p. 1295, 1993, doi = 10.1142/S0217751X93000539.
3. Wei-Jie Fu, Yu-Xin Liu, Mesonic excitations and pi-pi scattering lengths at finite temperature in the two-flavor Polyakov-Nambu-Jona-Lasinio model, Phys. Rev., D 79, 074011, 2009.
4. E. Quack, P. Zhuang, Yu. L. Kalinovsky, S. P. Klevansky, J. Hufner, scattering lengths at finite temperature, Physics Letters B., vol. 348, p. 1, 1995.

Связь динамики Земли со вспышками эпидемии Ковид-19**В.Е. Курьян, Д.Л. Осипов**

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Эпидемиология и математические модели хорошо прогнозируют динамику распространения инфекционных заболеваний и воздействие на динамику противоэпидемических мер. Но проблема Ковид-19, как мы понимаем сегодня, состоит в том, чтобы предсказать период появления новой волны Ковид-19. Сейчас мы наблюдаем вторую волну, начавшуюся в середине сентября. И картина в разных странах непохожа одна на другую.

Первой и второй волны уже достаточно, чтобы понять и описать, как формируются волны этого заболевания, а также выдвинуть гипотезу о причине начала волны. Причина состоит не в том, что вирус усиливает свою патогенность, а в том, что организм как биосистема по каким-то причинам начинает по-другому на него реагировать, как на стадии попадания вируса в организм, так и на его развитие в организме в рамках инкубационного периода и позже. Причиной может быть изменение физических условий, причем не все физические условия можно измерить температурой, влажностью, давлением и т.п. Процессы, протекающие внутри клетки человеческого организма, в существенной степени являются квантовыми. И на их протекание может влиять вакуум или вакуумное состояние материи, как состояние квантовой системы с наименьшей энергией. На примере Ковид-19 мы видим, что на распространение инфекционных заболеваний влияет динамика Земли как небесного тела. Так как волны Ковид-19 и, возможно, других эпидемий связаны с весенним и осенним равноденствиями как точками орбиты Земли, то можно в качестве рабочей гипотезы рассматривать воздействие на внутриклеточные процессы характера неинерциальности системы отсчета, неподвижной относительно поверхности Земли. Неинерциальность такой системы отсчета определяется динамикой Земли при её движении по орбите, вращением вокруг оси и изменением взаимной ориентации этих двух движений.

В настоящее время уже ясно, что характер эпидемии зависит от широты местности территории развития заболевания. Южнее 50 градуса северной широты картина развития явно другая, чем в Москве и странах Скандинавии, а также Голландии и Великобритании. Вторая волна эпидемии, разворачивающаяся на наших глазах, демонстрирует свою синхронность именно на северных территориях земного шара и привязана к равноденствию.

В развитии волны заболеваемости можно выделить периоды. Мы считаем, что зависимость подверженности заразным заболеваниям в значительной степени универсальна, хотя сегодня мы это наблюдаем именно на Ковид-19. Решая в процессе анализа данных заболеваемости Ковид-19 обратную задачу и считая, что коэффициент распространения заболеваемости зависит от времени не только из-за противоэпидемических мер, но и из-за изменения характеристик динамики Земли, мы по-новому описываем периодизацию волны заболевания.

Период формирования или период скачкообразного скрытого роста. Он занимает от 2 до 4 недель и зависит от широты местности. В этот период резко возрастает подверженность человеческого организма воздействию вируса, который продолжает циркулировать в человеческой среде в определенном количестве. Его начало носит взрывной характер, так как сразу формируется большая группа практически одновременно заболевших людей, которые начнут заражать других только через неделю-другую. И эта группа заболевших гораздо больше, чем распространителей вируса, «оставшихся» от предыдущей волны. Хотя количество этих вновь заболевших определяется именно распространенностью вируса до начала периода формирования. Поэтому первые недели в этот период и после него на быстро растущей кривой наблюдаются ступени и скачки роста. Особенности эпидемического процесса определяются соотношением длительности этого периода и среднего инкубационного периода заболевания.

Инфляционный период или период непрерывного роста. Защищенность человеческого организма от вируса возвращается к привычным значениям. Начинаются активные противоэпидемические мероприятия. Но вновь заболевших людей очень много, и они еще не знают, что являются источниками дальнейшего заражения. Характер роста постепенно меняется на плавный, хорошо описываемый современной эпидемиологией.

Период плато и период спада. Эти периоды нет смысла отделять друг от друга, так как переход плато в спад зависит от активности противоэпидемических мероприятий.

Как заранее предсказать период формирования? Первые две волны дают нам достаточно информации для этого. Это периоды вокруг точек весеннего и осеннего равноденствий длительно-стью от 2 до 4 недель. Причем периоды формирования сильнее выражены на северных территориях, расположенных ближе к полярному кругу, чем к тропику Рака. Волна весны 2020 года, по видимому, не была первой, но распространенность болезни волны осени 2019 года была настолько низкой, что органы санитарного контроля ее еще не заметили.

О периоде формирования третьей волны эпидемии. Уже очевидно, что этот период с запасом может быть покрыт интервалом 1 марта – 10 апреля 2021. Именно в это время необходимо проведение самых активных мероприятий по борьбе с эпидемией, так как вторая волна вызвала больше заболеваний, чем первая. Третья волна может оказаться еще более массовой. Необходимо заметить, что эпидемия так называемой «испанки», унесшей жизни миллионов людей, также вызывает наличие периода формирования, привязанного к осеннему равноденствию, согласно графику примерно вековой давности.

Анализ данных. Анализируя динамику заболеваемости Ковид-19 на разных компактных территориях, мы решаем обратную задачу, т.е. по кривой роста числа заболевших определяем коэффициент распространения заболевания как функцию времени. Мы выделили для нескольких северных территорий период в 2-4 недели вокруг точки осеннего равноденствия, когда наблюдается скачкообразный рост этого коэффициента в полтора и более раз.

УДК 539.12.01, 514.84

Стабильность хиггсовского потенциала в моделях с тремя дублетами Хиггса

***И.Ф. Антипов¹, Ю.Д. Ефременко², И.А. Новиков², А.В. Садовников³, К.А. Стародубец⁴,
А.Г. Чумаков⁵***

¹Волгоградский государственный университет

²Новосибирский государственный университет

³Московский авиационный институт

⁴Уральский федеральный университет

⁵Томский политехнический университет

Современная физика элементарных частиц базируется на Стандартной модели (СМ) – теории, построенной в прошлом веке и проверенной в тысячах экспериментов. Несмотря на все её успехи и нобелевские премии, давно известно, что СМ неполна. Космологические наблюдения, а также вопросы происхождения масс и смешиваний фермионов и нейтрино убедительно показывают, что обязан существовать более глубокий уровень описания микромира, включающий не только саму СМ, но и новые явления, выходящие за её рамки. При построении таких моделей вводится набор новых полей, описывают их взаимодействие при помощи лагранжиана на основе желаемого набора симметрий, или предполагаемых феноменологических особенностей, а затем вычисляют наблюдаемые последствия. Новые свободные параметры, входящие в лагранжиан, либо фиксируются путём подгонки данных, либо исследуются в поисках жизнеспособных и интересных версий модели. Поиск таких явлений в эксперименте и построение соответствующих теорий — одна из главных задач всей физики микромира.

Одно из популярных направлений при построении таких теорий — многохиггсовские модели [1,2]. В СМ используется простейшая версия хиггсовского механизма с одним хиггсовским дублетом (двумерным комплексным вектором) ϕ . Но популярна гипотеза, что хиггсовских дублетов может быть три, подобно трём поколениям кварков и лептонов. Первый вариант теории с тремя дублетами хиггсовских полей (3HDM) был предложен ещё Стивеном Вайнбергом в 1976 году [3]. С тех пор этот и многие другие варианты 3HDM изучались в сотнях статей.

При исследованиях физических последствий той или иной модели нужно сначала убедиться, что она математически самосогласованна. В частности, нужно убедиться, что в 3HDM хиггсовский потенциал ограничен снизу (условие BFB, bounded from below). Только в этом случае у потенциала может быть глобальный минимум, а значит, будет существовать и вакуум, относительно которого можно дальше строить теорию.

Задача

В простых случаях, например, 2HDM, их можно записать сразу [2,4]; в других случаях необходимо прибегнуть к более сложным инструментам, таким как методы копозитивности или алгебраические и геометрические построения в билинейном пространстве.

Для трёх дублетов Хиггса задача в общем виде остаётся нерешенной. Однако в отдельных версиях 3HDM, сопровождающихся дополнительными глобальными симметриями, структура потенциала Хиггса упрощается, и можно получить такие BFB условия.

Хиггсовский потенциал имеет простой вид, это многочлен степени не выше четырёх. Однако из-за большого количества переменных (хиггсовских полей), оказывается на удивление трудно найти точные критерии для его ограниченности снизу. Даже для исходной модели Вайнберга 1976 года до сих пор неизвестны необходимые и достаточные условия для того, чтобы потенциал был ограничен снизу.

Четверичная часть хиггсовского потенциала модели Вайнберга имеет следующий общий вид:

$$\begin{aligned} V_4 = & \frac{a_1}{2} (\phi_1^\dagger \phi_1)^2 + \frac{a_2}{2} (\phi_2^\dagger \phi_2)^2 + \frac{a_3}{2} (\phi_3^\dagger \phi_3)^2 + \\ & + b_{12} (\phi_1^\dagger \phi_1)(\phi_2^\dagger \phi_2) + b_{23} (\phi_2^\dagger \phi_2)(\phi_3^\dagger \phi_3) + b_{31} (\phi_3^\dagger \phi_3)(\phi_1^\dagger \phi_1) + \\ & + c_{12} |\phi_1^\dagger \phi_2|^2 + c_{23} |\phi_2^\dagger \phi_3|^2 + c_{31} |\phi_3^\dagger \phi_1|^2 + \\ & + [d_{12} (\phi_1^\dagger \phi_2)^2 + d_{23} (\phi_2^\dagger \phi_3)^2 + d_{31} (\phi_3^\dagger \phi_1)^2 + \text{компл.сопр.}] \end{aligned}$$

BFB-условия — это необходимые и достаточные условия, которым должны удовлетворять коэффициенты потенциала V_4 , чтобы потенциал был ограничен снизу. В 2009 году была опубликована статья [5], в которой были представлены такие условия. Однако в прошлом году в публикации [6] было показано, что эти результаты содержат ошибки. Таким образом, BFB-задача для потенциала Вайнберга остаётся нерешенной, хотя отдельные частные случаи уже были проанализированы в [1, 7] и [6].

Ход работы

В ходе коллективного исследования, выполненного в рамках Первого воркшопа Математического центра в Академгородке (Новосибирск) [8], были разработаны методы, направленные на решение BFB-задачи в модели Вайнберга:

- метод коположительности;
- запись V_4 в виде эрмитовой формы от ϕ_i , дополненной более сложным слагаемым, и поиск удобных координат в $\mathbb{C}^3$;
- геометрические методы в разных постановках.

Также в ходе работы проводились независимые численные эксперименты на Mathematica и Python.

Авторы выражают признательность организаторам воркшопа и Иванову Игорю Пьеровичу за чуткое научное руководство, а также Бускину Николаю Владиславовичу и Лыткиной Дарье Викторовне за продуктивную рабочую атмосферу.

Несмотря на то, что задача в её полном виде пока не решена, были получены результаты, выходящие за рамки уже опубликованных примеров [1, 6, 7].

Литература

1. *Ivanov I.P.* Building and testing models with extended Higgs sectors // *Progress in Particle and Nuclear Physics*. 2017. V. 95. P. 160-208.
2. *Branco G.C. [et al].* Theory and phenomenology of two-Higgs-doublet models // *Physics reports*. 2012. V. 516, №. 1-2. P. 1-102.
3. *Weinberg S.* Gauge Theory of CP Violation // *Phys.Rev.Lett.* 1976. V. 37. P. 1-12.
4. *Ivanov I.P.* Minkowski space structure of the Higgs potential in 2HDM // *Physical review D: Particles and fields*. 2007. V. 75, № 3. P. 035001.
5. *Grzadkowski B., Og Reid O.M., Osland P.* Natural multi-Higgs model with dark matter and C P violation // *Physical Review D*. 2009. V. 80, №. 5. P. 055013.2.
6. *Faro F.S., Ivanov I.P.* Boundedness from below in the $U(1) \times U(1)$ three-Higgs-doublet model // *Physical Review D*. 2019. V. 100, №. 3. P. 035038.
7. *Ivanov I.P., Vazão F.* Yet another lesson on the stability conditions in multi-Higgs potentials // *arXiv preprint arXiv:2006.00036*. – 2020.10.24.

УДК 530.1

Ток фермионов на фоне внешнего пульса

А.В. Анохин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Основной задачей квантовой теории поля является расчет корреляционных функций.

Корреляционные функции интересны тем, что они соответствуют измеримым физическим величинам. Квантовая теория поля позволяет вычислять данные величины как в древесном случае, так и считать петлевые поправки к ним. Петлевые поправки вычисляются по диаграммным техникам с помощью теории возмущений.

В стационарном случае для расчёта петлевых поправок можно использовать диаграммную технику Фейнмана. А в более сложных случаях нестационарных полей нужно использовать более общую технику Келдыша-Швингера. В случае, когда в теории имеется температура, можно пользоваться Мацубаровской диаграммной техникой для квазистационарных возмущений.

В данной работе качестве корреляционной функции изучается фермионный ток под воздействием внешнего электрического пульса в четырёхмерии. Мы подробно останавливаемся на изучении лишь древесного случая, так как и он несет уже достаточно много интересной информации.

Задачи подобного типа были исследованы и ранее. Например, рассматривались теории, в которых исследовался фермионный ток на фоне поля скалярных бозонов [1], [2] и [3]. Интересно, что такие задачи можно ставить в различных измерениях и для различных форм фонового поля и получать при этом качественно разные результаты.

Наша задача состоит в том, чтобы исследовать электронный ток в четырёхмерной квантовой электродинамике на фоне внешнего электрического пульса. Действие исследуемой теории имеет следующий вид:

$$S = \int d^4x \left(-\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \bar{\psi} (i\gamma^\mu D_\mu - m) \psi - j^{\mu,cl} A_\mu \right)$$

Здесь стандартным образом введены обозначения:

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu; \quad D_\mu = \partial_\mu + ieA_\mu.$$

Явный вид рассматриваемой нами конфигурации внешнего классического электрического пульса:

$$A_\mu^{cl} = \left(0, 0, 0, ET \tanh \left(\frac{t}{T} \right) \right).$$

В следующей части данной работы приводится решение уравнения Дирака на фоне электрического пульса и производится выбор мод, удовлетворяющих адамаровому поведению. Такой выбор мод, в частности, при $t \rightarrow -\infty$ зануляет ток. Далее проводится квантование фермионного поля и производится вывод выражения для тока в классическом случае для произвольной конфигурации внешнего поля. После этого уже для полученных мод выводятся интегральные выражения для тока в случае времени, стремящегося к плюс бесконечности. После проверки полученного интеграла на сходимости проводится его вычисление. В заключении делается сравнение полученного результата для тока при $t \rightarrow +\infty$ методами Швингера и методом решения уравнения Дирака на фоне внешнего поля и формулируется вывод о совпадении этих результатов.

Главным результатом работы является выражение для тока при $t \rightarrow +\infty$:

$$\langle J^3 \rangle_{tree}^{t=+\infty} \approx \frac{2}{(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} dp_\perp \int_{-eET}^{eET} dp_3 \left(e^{-\frac{\pi m^2}{eE}} e^{-\frac{\pi p_\perp^2}{eE}} p_\perp \right) \approx \boxed{\frac{(eE)^2 T}{2\pi^3} \exp \left(-\frac{\pi m^2}{eE} \right)}$$

Это выражение справедливо для тока в случае сильных полей E , больших T и малых масс m :

$$eET^2 \gg 1, \quad eET \gg m.$$

Мы получили, что ток с течением времени меняется от нуля до некоторого фиксированного значения. В силу аналитичности тока как функции времени, при произвольном значении времени ток должен быть конечной величиной. Такое требование на аналитичность следует из того, что ток есть физическая величина.

Более подробно с тонкостями в выборе мод и вычислениями разного рода токов можно ознакомиться в наборе статей от специалистов в этой области А.А. Гриба, С. П. Гаврилова и Д. М. Гитмана [4-9].

Литература

1. Akhmedov E.T., Lanina E.N., Trunin D.A. Quantization in background scalar fields // Phys. Rev. D. 2020. Т. 101, № 2. с. 025005.
2. Akhmedov E.T., Astrakhantsev N., Popov F.K. Secularly growing loop corrections in strong electric fields // JHEP. 2014. Т. 09. с. 071.
3. Akhmedov E.T., Popov F.K. A few more comments on secularly growing loop corrections in strong electric fields // JHEP. 2015. Т. 09. с. 085.
4. Гриб А. А. Мамаев С. Г. Мосепенанко В. М. Вакуумные квантовые эффекты в сильных полях. Энергоатомиздат, 1988. с. 288.
5. Gavrilov S.P., Gitman D.M. Vacuum instability in external fields // Phys. Rev. D. 1996. Т. 53. С. 7162–7175.
6. Gavrilov S.P., Gitman Dmitry M. One-loop energy-momentum tensor in QED with electriclike background // Phys. Rev. D. 2008. Т. 78. с. 045017.
7. Gavrilov S.P., Gitman D.M. Energy-momentum tensor in thermal strong-field QED with unstable vacuum // J. Phys. A. 2008. Т. 41. с. 164046.
8. Gavrilov S.P., Gitman D.M. Consistency restrictions on maximal electric field strength in QFT // Phys. Rev. Lett. 2008. Т. 101. с. 130403.
9. Gavrilov S.P., Gitman D.M., Yokomizo N. Dirac fermions in strong electric field and quantum transport in graphene // Phys. Rev. D. 2012. Т. 86. с. 125022.

УДК 530.1

Три–векторные деформации решений 11–ти мерной супергравитации

К.А. Губарев^{1,2}, Э.Т. Мусаев^{1,3}, И.В. Бахматов^{4,5}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова
НИИЦ «Курчатовский институт»

³ Казанский федеральный университет «Институт физики»

⁴ Институт теоретической и математической физики МГУ им. М.В. Ломоносова

⁵ Ереванский физический институт

Мы рассматриваем разбиение $SL(5)$ исключительной теории поля для пространств вида $M_{11} = M_4 \times M_7$ [1], с метрикой h_{mn} на внутреннем 4-мерном пространстве, не зависящей от внешних координат y^μ . Для полей A_μ^{MN} и $B_{\mu\nu M}$ $SL(5)$ исключительной теории поля, обобщенной метрики m_{MN} и внешней метрики $g_{\mu\nu}$ мы используем анзац:

$$g_{\mu\nu} = g_{\mu\nu}(y^\mu, x^m), \quad m_{MN} = m_{MN}(x^m),$$

$$A_\mu^{MN} = 0, \quad B_{\mu\nu M} = 0, \quad (1)$$

а также перешкалируем поля следующим образом:

$$g_{\mu\nu} = e^{-2\phi(x^m)} h^{\frac{1}{5}} \bar{g}_{\mu\nu}(y^\mu),$$

$$m_{MN} = e^{-\phi(x^m)} h^{\frac{1}{10}} M_{MN}(x^m). \quad (2)$$

Здесь греческие индексы $\mu, \nu, \dots = 1, \dots, 7$ – индексы внешнего пространства, а заглавные латинские $M, N, \dots = 1, \dots, 10$ – индексы обобщенного пространства, h – детерминант внутренней метрики.

В результате, Лагранжиан SL(5) исключительной теории поля принимает вид:

$$L = \bar{e} M^{-1} (R[\bar{g}_{(7)}]) - \frac{1}{8} M^{KL} M^{MN} \partial_{KM} M_{PQ} \partial_{LN} M^{PQ} - \frac{1}{2} \partial_{NK} M^{MN} \partial_{ML} M^{KL} + \frac{1}{2} M^{KL} M^{MN} \partial_{MK} M^{PQ} \partial_{PL} M_{NQ} + M^{KL} M^{MN} \partial_{KP} M_{MN} \partial_{LQ} M^{PQ} - \frac{15}{24} M^{KL} M^{MN} M^{PQ} M^{RS} \partial_{MP} M_{KL} \partial_{NQ} M_{RS}, \quad (3)$$

где M_{MN} – обобщенная метрика, M – её детерминант, $\bar{e}$ – детерминант внешнего перешкалированного репера, $R[\bar{g}_{(7)}]$ – скаляр Риччи для внешней перешкалированной метрики.

Мы показываем, что стандартный Лагранжиан SL(5) исключительной теории поля [2], с обобщенной метрикой параметризованной в С-фрейме:

$$m_{MN} = h^{\frac{1}{10}} \begin{pmatrix} h^{\frac{1}{2}} h_{mn} & -V_m \\ -V_m & \pm h^{\frac{1}{2}} (1 \pm V_k V^k) \end{pmatrix}, \quad V^m = \frac{1}{6} \varepsilon^{mnkl} C_{nkl}, \quad M_{MN} = e^\phi \begin{pmatrix} h^{\frac{1}{2}} h_{mn} & -V_m \\ -V_m & \pm h^{\frac{1}{2}} (1 \pm V_k V^k) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

совпадает с бозонной частью Лагранжиана 7+4 супергравитации для полей $g_{\mu\nu}$, h_{mn} , C_{nkl} . Таким образом, решения SL(5) исключительной теории поля переписанные в С-фрейме являются решениями 7+4 супергравитации.

Мы предлагаем способ построения деформаций решений путем Ω -сдвига обобщенной метрики (обобщенная деформация Янга-Бакстера):

$$O[\Omega] = \begin{pmatrix} \delta_m^n & 0 \\ \frac{h^{-1}}{6} \varepsilon_{mpqr} \Omega^{pqr} & 1 \end{pmatrix}, \quad M_{MN}^{deformed} = O_M^P O_N^Q M_{PQ}, \quad (5)$$

где $\Omega^{pqr} = \frac{1}{6} \rho^{\alpha\beta\gamma} k_\alpha^p k_\beta^q k_\gamma^r$, $\rho^{\alpha\beta\gamma}$ – матрица коэффициентов (параметр деформации), k_α^p – векторы Киллинга деформируемого решения.

После деформации обобщенная метрика снова может быть переписана в С-фрейме (4). Переход от изначальных полей к деформированным дается обобщением открыто-закрытого отображения

$$G_{\mu\nu}^{deformed} = K^{-\frac{1}{3}} g_{\mu\nu},$$

$$G_{mn}^{deformed} = K^{\frac{2}{3}} (g_{mn} \pm (1 \pm V^2) W_m W_n - 2V_{(m} W_{n)}),$$

$$(C^{mnk})^{deformed} = K^{-1} (C^{mnk} + (1 \pm \frac{1}{6} C^2) \Omega^{mnk}),$$

$$K^{-1} = 1 \pm W^2 - 2W_m V^m + (W_m V^m)^2, \quad W_m = \frac{1}{6} \varepsilon_{mpqr} \Omega^{pqr}. \quad (6)$$

Мы требуем, чтобы фон, получающийся в результате деформации, снова решал уравнения SL(5) исключительной теории поля в С-фрейме (а значит и уравнения супергравитации), что дает

некоторые ограничения на параметр $\rho^{\alpha\beta\gamma}$, которые, как ожидалось, должны быть некоторым обобщением уравнения Янга-Бакстера.

Развитый формализм применен для построения деформаций решения $AdS_4 \times S^7$, вектора Киллинга которого образуют конформную алгебру AdS_4 , включающую трансляции $-P_a$, дилатацию $-D$, вращения $-M_{ab}$, специальные конформные преобразования $-K_a$ (где индекс AdS_4 разбит $m=(a, z)$). В результате найдены следующие примеры деформаций:

$\Omega = 4\eta P_0 \wedge P_1 \wedge P_2$ – генерирует решение $\forall \eta$, деформированное решение может быть редуцировано в решение 10-ти мерной ПА теории, является абелевой, неунимодулярной деформацией ($\partial_p \Omega^{pqr} \neq 0$);

$\Omega = 4\rho^{ab,cd} P_a \wedge P_b \wedge M_{cd}$ – генерирует решение $\forall \rho^{ab,cd}$, существенно 11-ти мерная деформация, деформированное решение не может быть редуцировано в 10-ти мерную теорию, является неабелевой, неунимодулярной деформацией;

$\Omega = \frac{2}{R^3} \rho_a \varepsilon^{abc} D \wedge P_b \wedge P_c$ – генерирует решение при $\rho^2 = -\rho_0^2 + \rho_1^2 + \rho_2^2 = 0$, существенно 11-ти мерная деформация, деформированное решение не может быть редуцировано в 10-ти мерную теорию, является неабелевой, неунимодулярной деформацией.

На полученных примерах протестированы гипотетические уравнения на деформации [3,4], показано что ни одно из них не является одновременно необходимым и достаточным.

Для флакс формулировки $SL(5)$ исключительной теории поля найдены деформации флаксов под действием обобщенной деформации Янга-Бакстера. Показано, что все флаксы деформируются пропорционально $\partial_p \Omega^{pqr} \propto f_{ab}^{[c} \rho^{d]ab}$, что говорит о том, что условие унимодулярности достаточное (но не необходимо) для того, чтобы деформированное решение было решением. Предъявленные выше примеры являются неянгдакстеровскими и поэтому не удовлетворяют этому условию. Наличие нетривиального условия на деформацию, типа обобщенного уравнения Янга-Бакстера, отличного от унимодулярности, ожидается в исключительных теориях поля с большей группой U -дуальности (например $E_{6(6)}$).

Работа выполнена при поддержке Российского Министерства образования и науки (Проект 5-100).

Литература

1. Bakhmatov I., Gubarev K., Musaev E.T. Non-abelian tri-vector deformations in d=11 supergravity // JHEP. 2020. V. 05. P. 113.
2. Musaev E.T. Exceptional field theory $SL(5)$ // JHEP. 2016. V. 02. P. 012.
3. Bakhmatov I., and Deger N.S., Musaev E.T., Colgain E.O, Sheikh-Jabbari M.M. Tri-vector deformations in d=11 supergravity // JHEP. 2019. V. 08. P. 126.
4. Sakatani Y. U-duality extension of Drinfel'd double // PTEP. 2020 №2. P. 023B08

УДК 530.145

Функциональные уравнения Гамильтона – Якоби, Шрёдингера и Вильсона – Полчински

М.Г. Иванов¹, А.Е. Калугин¹, А.А. Огаркова¹, С.Л. Огарков¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В данной работе рассматриваются функциональное уравнение Гамильтона – Якоби (1), являющееся центральным уравнением голографической ренормализационной группы (ГРГ), функциональное уравнение Шрёдингера (2) и функциональное уравнение Вильсона – Полчински (3), которое, в свою очередь, является центральным уравнением функциональной ренормализационной

группы (ФРГ). Также исследуется управляющее уравнение, частным случаем которого является функциональное уравнение (3).

$$\frac{\delta S[\Lambda, \varphi, \varpi]}{\delta \Lambda[z]} = H[\Lambda, \varphi, \varpi](z) \quad 1$$

$$\frac{\delta \Psi[\Lambda, \varphi]}{\delta \Lambda(z)} = i \hat{H}(z) \Psi[\Lambda, \varphi] \quad 2$$

$$\frac{\delta G[\Lambda, \varphi]}{\delta \Lambda(z)} = \frac{1}{2} \int d^D x_1 \int d^D x_2 \frac{\delta K[\Lambda](x_1, x_2)}{\delta \Lambda(z)} \left\{ \frac{\delta^2 G[\Lambda, \varphi]}{\delta \varphi(x_1) \delta \varphi(x_2)} + \frac{\delta G[\Lambda, \varphi]}{\delta \varphi(x_1)} \frac{\delta G[\Lambda, \varphi]}{\delta \varphi(x_2)} \right\} \quad 3$$

Данные уравнения сформулированы в D-мерном координатном представлении (в работе [1] также дана формулировка в терминах абстрактного пространства), а вместо дополнительных координат или ФРГ-масштаба (ренормгруппового времени) введено «голографическое» скалярное поле Λ . Дополнительную координату или ФРГ-масштаб мы получаем как амплитуду дельта-полевой конфигурации Λ .

Для всех рассматриваемых функциональных уравнений мы приводим строгий вывод соответствующих иерархий (бесконечных систем интегро-дифференциальных уравнений для функций Грина), а также вывод формулы интегрирования для функционалов. Преимущество иерархии Гамильтона – Якоби по сравнению с иерархиями Шрёдингера или Вильсона – Полчински состоит в том, что иерархия Гамильтона – Якоби разбивается на независимые уравнения. С помощью формулы интегрирования получено функциональное (для произвольной конфигурации Λ) решение для трансляционно-инвариантной двухчастичной функции Грина. Для дельта-полевой конфигурации Λ данное решение имеет вид:

$$S(\Lambda) = B \Lambda^{(b_d+1)} \frac{CK_d(X) + I_d(X)}{CK_d(X) + \tilde{I}_d(X)} \quad 4$$

Кратко обсуждается сепарабельное решение для двухчастичных функций Грина. Далее в работе приводится строгий вывод квантового функционального уравнения Гамильтона – Якоби и функционального уравнения непрерывности из функционального уравнения Шрёдингера, а также вывод квазиклассического приближения. Предлагается итерационная процедура решения функционального уравнения Шрёдингера. Получены трансляционно-инвариантные решения для различных функций Грина обеих иерархий для дельта-полевой конфигурации Λ . В контексте уравнения непрерывности и открытых квантовополевых систем кратко обсуждается оптический потенциал и нелинейное функциональное уравнение Шрёдингера.

Далее в работе проанализирован функционал роста крупнозернистости мод в модели Вильсона – Полчински. На основе этого анализа предлагается схема аппроксимации функционального уравнения Вильсона – Полчински (данная схема применима также и к управляющему уравнению). С помощью регулятора Литима из аппроксимированной иерархии Вильсона – Полчински найдены аналитически трансляционно-инвариантные решения для двухчастичных (5) и четырёхчастичных (6) ампутированных функций Грина. При $\Lambda = 0$ эти решения монотонны по каждой из импульсных переменных.

$$G(\Lambda = 0; k) = -2g_3 k + \sqrt{g_3 k^3} \frac{K_1(\kappa)}{K_2(\kappa)} \quad 5$$

$$G(k_1, k_2, k_3, k_4) = -16g \prod_{j=1}^4 \left(\frac{1}{\kappa_j (\kappa_j K_0(\kappa_j) + 2K_1(\kappa_j))} \right) \quad 6$$

Отметим в завершение, что общие выражения для функционала роста крупнозернистости мод, полученные в рамках данной работы, могут быть использованы для построения высших регуляторов метода ФРГ.

Литература

1. *Ivanov, M.G.; Kalugin, A.E.; Ogarkova, A.A.; Ogarkov, S.L.* On Functional Hamilton–Jacobi and Schrödinger Equations and Functional Renormalization Group. *Symmetry* 2020, *12*, 1657.
2. *Kopietz, P.; Bartosch, L.; Schütz, F.* Introduction to the Functional Renormalization Group; Lecture Notes in Physics; Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, 2010.

Секция физики высоких плотностей энергии

Председатель: О.Ф. Петров (д.ф.-м.н., акад. РАН, профессор)

Зам. председателя: Е.А. Лисин (к.ф.-м.н.)

Секретарь: Д.В. Сазонова

Дата: 25.11.2020 Время: 10:00

УДК 536.71

Автомодельность нелинейного экранирования в резко-асимметричной комплексной плазме

И.А. Мартынова^{1,2}, И.Л. Иосилевский^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

В данной работе исследуются особенности нелинейного экранирования микроионами высоко-заряженных макроионов в классической асимметрично заряженной плазме. Изучаются двух-компонентные электронейтральные системы макроионов и противоположно заряженных микроионов в сферически-симметричной электронейтральной ячейке Вигнера-Зейтца с центральным макроионом. Данная работа посвящена проблеме соотношения между эффективным («видимым») зарядом макроиона Z^* и его исходным зарядом Z при учете эффекта нелинейного экранирования. Анализируется, как меняется это соотношение с ростом величины заряда центрального макроиона. Вычислены характеристики двух режимов в этой зависимости эффективного заряда от исходного [1,2]. Продемонстрирована автомодельность указанной зависимости для различных температур системы, концентраций макроионов и параметров упаковки.

Литература

1. *Martynova I., Iosilevskiy I., Shagayda A.* Macroions non-linear screening in complex plasma // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 946. P. 012147.
2. *Martynova I., Iosilevskiy I., Shagayda A.* Non-linear screening and phase states of a complex plasma // Contrib. Plasma Phys. 2018. V. 58. P. 203.

УДК 532.529:541.182

Влияние молекулярной массы полимера на кинетику образования кластеров в потоке

В.С. Судаков¹, О.Ф. Петров^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Анализ проблемы образования кластеров из коллоидных частиц в водных растворах полимеров актуален как с фундаментальной точки зрения [1], так и при исследовании вопросов, связанных с тромбообразованием [2]. Впервые возможность взаимного притяжения частиц в растворе полимера установили Асакура и Осава в 1954 г. [3]. Природа возникновения силы истощения носит энтропийный характер. Вокруг коллоидной частицы существует «исключенный объем», куда не могут проникать центры полимерных клубков. При сближении частиц, общий исключенный объем уменьшается, что приводит к росту числа доступных состояний для полимерных молекул в рас-

творе, поэтому обе фазы сепарируются. Вопросы кристаллизации коллоидных частиц в неподвижных полимерных растворах во многом хорошо изучены [1], однако задаче исследования влияния сдвиговых деформаций на процесс образования кластеров уделено гораздо меньшее внимание [4]. В данной работе исследуется кинетика образования кластеров из частиц кобальта (2 мкм) в присутствии магнитного поля. Частицы кобальта были диспергированы в водном растворе полиэтиленгликоля. Суспензия прокачивалась через трубку с диаметром 1 мм. Образование кластеров осуществлялось на препятствии, которое устанавливалось внутри канала (Рис. 1а). Результаты экспериментов показывают, что при увеличении молекулярной массы полиэтиленгликоля, при прочих равных условиях, существенно возрастала скорость роста кластеров в потоке (Рис. 1с). Обусловлено это тем, что при увеличении молекулярной массы полимера, возрастает объем полимерного клубка, поэтому сепарация фаз коллоидные частицы/полимер будет осуществляться с большим выигрышем энтропии.

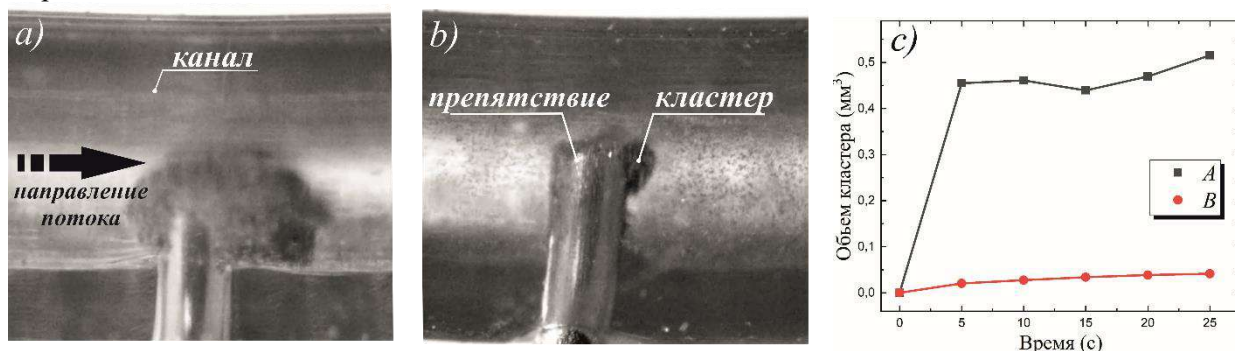


Рис. 1. (а) Фотография кластера; полиэтиленгликоль 1500; (b) полиэтиленгликоль 400; (c) зависимость объема кластера от времени: А - полиэтиленгликоль 1500, В - полиэтиленгликоль 400. Во всех экспериментах массовый расход суспензии составлял 2 мл/ч.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант «Аспиранты» № 20-32-90037\20).

Литература

1. Anderson V. J., Lekkerkerker H. N. W. Insights into phase transition kinetics from colloid science // Nature. 2002. V 416. P. 811 – 815.
2. Nesbitt W. S., Westein E., Tovar-Lopez F. J., Tolouei E., Mitchell A., Jia Fu, Carberry J., Fouras A., Jackson S. P. A shear gradient-dependent platelet aggregation mechanism drives thrombus formation. Nature Medicine. 2009. V 15(6). P 665–673.
3. Wua Y. L., Derksa D., Blaaderena A., Imhofa A. Melting and crystallization of colloidal hard-sphere suspensions under shear. PNAS. 2009. V 106 (26). P 10564-10569.
4. Asakura S., Oosawa F. On interaction between two bodies immersed in a solution of macromolecules. J. Chem. Phys. 1954. V 22. P 1255-1256.

УДК 533.9.082.7

Вращение плазмы в отражательном разряде с термокатодом

А.П. Ойлер^{1,2}, Г.Д. Лизякин¹, А.В. Гавриков^{1,2}

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН)

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Перед современной атомной энергетикой среди прочих задач стоит такая актуальная проблема как переработка отработавшего ядерного топлива (ОЯТ). Весьма многообещающими являются плазменные методы переработки ОЯТ, предполагающие перевод конденсированного вещества в плазменное состояние и последующее разделение тяжёлых и лёгких компонентов в электрических и магнитных полях [1].

Одним из ключевых вопросов для плазменных методов, базирующихся на применении масс-фильтра Окавы Т. [2] и сепаратора Смирнова В.П. [3], является создание заданного пространственного распределения электростатического потенциала в плазме с замагниченными электронами. В

цилиндрической камере, заполненной плазмой и помещённой в магнитное поле параллельное её оси, должно быть создано радиальное электрическое поле заданной конфигурации (см рис. 1).

Находясь в скрещенных электрических и магнитных полях, плазма начинает вращаться и испытывать трение о поверхность камеры, а соседние слои друг об друга. Это приводит к тому, что, во-первых, такая плазма может оказаться неустойчивой и, во-вторых, к снижению скорости вращения.

В данной работе исследовался радиальный профиль скорости вращения плазмы. Направленные потоки ионов измерялись с помощью зонда Маха. Было исследовано радиальное распределение потоков ионов в аксиальном и азимутальном направлениях. Исследовалась аргонная плазма отражательного разряда при наличии аксиального магнитного поля 1400 Гс в камере цилиндрической формы длиной 220 см и внутренним диаметром 86 см [4]. В камере установлены дополнительные кольцевые диафрагмирующие фланцы, которые ограничивают исследуемую область разряда на радиусе 25 см. Все измерения проводились при давлении $4.6 \cdot 10^{-4}$ торр и токе разряда 10 А. Конфигурация радиального электрического поля задаётся двумя торцевыми электродами, на одном из которых находится термоэмиссионный катод. На рис. 2 представлены радиальные профили скоростей потоков в плазме, направленных вдоль магнитного поля (вдоль оси камеры) и азимутальной скорости.

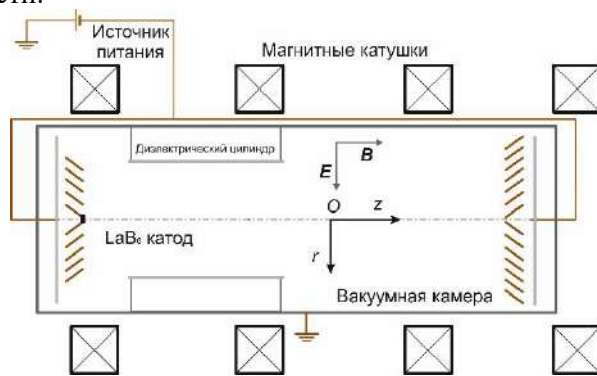


Рис.1. Схема экспериментальной установки.

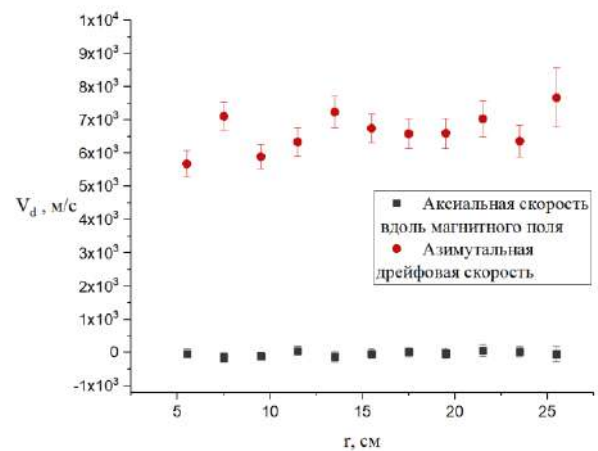


Рис.2. Радиальное распределение аксиальной и азимутальной скоростей потока плазмы.

Согласно [5] число Маха определялось как

$$M = M_c \ln(R),$$

$$M_c = 4 \sqrt{\frac{T_e}{T_i}}$$

где

где R – отношение токов, собираемых с противоположных коллекторов зонда Маха. Экспериментальные значения были получены в предположении, что температура ионов составляет 0.025 эВ. Как видно из рис. 2, было выяснено, что аксиальная скорость потока ионов равна нулю, а азимутальная скорость постоянна при всех радиальных координатах. Это говорит о том, что в камере сепаратора присутствует нетвердотельное плоское вращение плазмы вокруг оси, совпадающей с осью камеры.

Работа частично поддержана грантом Министерства Образования и Науки России МК-2403.2020.

Литература

1. D. A. Dolgolenko and Y. A. Muromkin, *Physics-Uspekhi* **60**, 994 (2017).
2. T. Ohkawa and R. L. Miller, *Phys. Plasmas* **9**, 5116 (2002).
3. R. K. Amirov, N. A. Vorona, A. V. Gavrikov, G. D. Liziakin, V. P. Polistchook, I. S. Samoylov, V. P. Smirnov, R. A. Usmanov, and I. M. Yartsev, *Phys. At. Nucl.* **78**, (2015).
4. G. Liziakin, A. Gavrikov, R. Usmanov, R. Timirkhanov, and V. Smirnov, *AIP Adv.* **7**, (2017).
5. M. Hudis and L. M. Lidsky, *Journal of Applied Physics* **41**, 5011 (1970).

Выбор смесей, моделирующих ОЯТ оксидного типа, для экспериментов по плазменной сепарации и теоретических расчётов

Л.С. Волков^{1,2}, Н.Ю. Бабаева², Н.Н. Антонов², А.В. Гавриков², В.П. Смирнов²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Плазменная сепарация – это перспективный способ рекуперации отработавшего ядерного топлива (ОЯТ). Её цель – отделение тяжёлых атомов актинидов от лёгких продуктов распада. Процесс плазменной сепарации предполагает превращение ОЯТ в поток однократно ионизированной низкотемпературной плазмы и пространственное разделение (сепарацию) атомов и молекул этого потока по массам, в условиях буферного разряда при низком давлении, и в специальной конфигурации электрического и магнитного полей [1].

Работа с ОЯТ требует соблюдения специальных мер предосторожности. Поэтому на текущем этапе разработки технологии плазменной сепарации требуются модельные смеси. Они должны состоять из относительно недорогих и безопасных для работы веществ, но при этом иметь свойства, близкие к ОЯТ. В экспериментах по плазменной сепарации в Лаборатории 2.1. ОИВТ РАН в настоящее время используются смеси металлов (например, серебра и свинца).

Данная работа посвящена поиску составов оксидных модельных смесей, которые обладают рядом свойств, присущих ОЯТ оксидного типа, и предполагаются удобными для проведения экспериментов. Также, в рамках этой работы была показана возможность компьютерного расчёта (в программе KINEL) равновесного химического состава газа, образованного соединениями элементов из предложенных модельных смесей.

Был выбран конкретный тип оксидного ОЯТ (топливо реакторов ВВЭР-440 10-летней выдержки), атомарный состав которого подробно задокументирован [2]. Для этого состава была найдена пропорция, отражающая соотношение между количеством атомов кислорода $\nu(O)$, актинидов $\nu(Act)$, и остальных элементов (исключая инертные газы) $\nu(Rest)$:

$$\nu(O) : \nu(Act) : \nu(Rest) = 66,1\% : 31,6\% : 2,3\% \quad (1)$$

Было принято решение о том, что простейшая модельная смесь должна быть образована соединениями кислорода и двух металлов, в том же соотношении, что и (1). В качестве первого металла был выбран церий, на основании его близких к урану свойств, согласно работе [3]: зависимость давления насыщенных паров от температуры, теплота сублимации, соотношение температур плавления металла и оксида, а также атом-электронное соотношение.

Для выбора второго металла были использованы два основных критерия. Первый критерий – это атомная масса элемента μ_{elem} :

$$\frac{\mu_{Ce}}{\mu_{elem}} \approx \frac{\mu_U}{\mu_{cut}} = \frac{238 \text{ а.е.м.}}{160 \text{ а.е.м.}} \approx 1,5 \quad (2)$$

где μ_U и μ_{Ce} – это атомные массы урана и церия соответственно; $\mu_{cut} = 160 \text{ а.е.м.}$ – это условная атомная масса отсечки, верхняя граница спектра масс осколков ядерного деления в ОЯТ.

Такое соотношение масс удобно для экспериментов, поскольку в плазменной сепарации отношение масс сепарируемых атомов – один из ключевых безразмерных параметров [1].

Второй критерий – давление насыщенных паров. Были отобраны вещества, давление насыщенных паров которых сопоставимо с давлением насыщенных паров стехиометрического диоксида церия в широком диапазоне температур, согласно справочнику [4]. Это необходимо для того, чтобы составные вещества модельной смеси испарялись не последовательно, а одновременно, что удобно для отладки процесса сепарации.

На основании этих критериев, были предложены два состава твёрдых модельных смесей (доли мольные):

$$1) 96\% CeO_2; 2,9\% Y_2O_3; 1,1\% Y; \quad 2) 93\% CeO_{1,95}; 7\% TiO_2 \quad (3)$$

Следует ожидать, что испарение модельных смесей будет неконгруэнтным. Поэтому потребуются экспериментальное исследование состава пара, образующегося при их испарении. Будет

необходимо прибегнуть к численному моделированию для верификации экспериментальных результатов и их экстраполирования в различные области давления и температуры. В рамках данной работы, на основе кода KINEL была начата разработка компьютерной модели, рассчитывающей (на основе химических справочных данных) равновесный химический состав пара, в составе которого присутствуют элементы O, Ce, Y, Ti. Описание программы KINEL и пример её применения можно найти в работе [5]. На рис. 1 приведён пример предварительного (тестового) расчёта равновесного химического состава пара, атомарный состав которого совпадает с составом второй модельной смеси (3), при фиксированном объёме и постоянном количестве атомов (в расчёте, отвечающем графику на рис. 1 объём составлял 1 см^3 , а число атомов церия $2,2 \cdot 10^{13}$). Эта численная модель требует доработки, но является заделом для будущих численных теоретических расчётов, и будет применяться при обработке экспериментальных данных по определению состава пара модельных смесей.

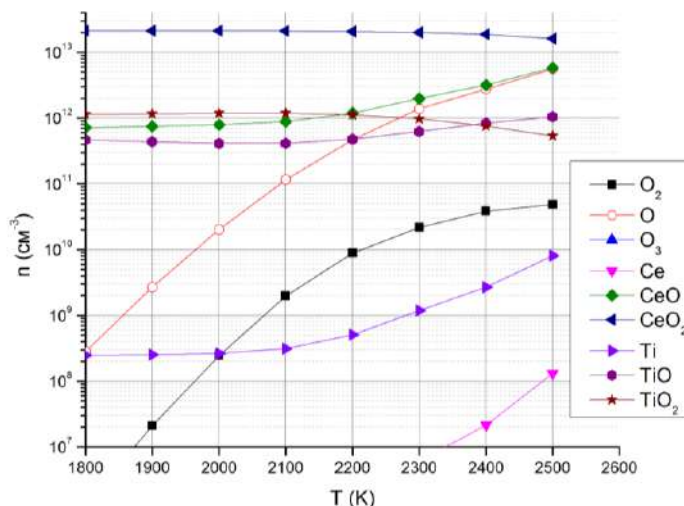


Рис.1. Пример расчёта температурной зависимости равновесных концентраций компонент состава пара, атомарный состав которого совпадает с одной из предложенных в работе модельных смесей.

Литература

1. Смирнов В.П., Самохин А.А., Ворона Н.А., Гавриков А.В. Исследование движения заряженных частиц в различных конфигурациях полей для развития концепции плазменной сепарации отработавшего ядерного топлива // Физика плазмы. 2013. Т. 39, Вып. 6. – с. 523–533.
2. Колобашкин В.М. [и др.] Радиационные характеристики облученного ядерного топлива – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 385 с.
3. Usmanov R.A. [et al.] Diffuse vacuum arc on cerium dioxide hot cathode // Physics of Plasmas 25, 063524 (2018); doi: 10.1063/1.5037674
4. Казенас Е.К. [и др.] Термодинамика испарения оксидов – М.: ЛКИ, 2008. – 480 с.
5. Creighton Y.L.M. [et al.] In-situ investigation of pulsed corona discharge // EUT report. E, Fac. of Electrical Engineering; V. 93-E-279, 1993.

УДК 53.03

Гидродинамическое описание расширения квантово-электродинамического каскада в поле интенсивного лазерного импульса

А.С. Самсонов, И.Ю. Костюков

Институт прикладной физики РАН

В данной работе рассматривается развитие квантово-электродинамического (КЭД) каскада в поле экстремально интенсивной плоской волны. Результаты полноразмерного моделирования с помощью метода частиц в ячейках (ЧВЯ) с учётом КЭД процессов показывают, что при превышении некоего порога по интенсивности волны взаимодействие такой волны даже с неподвижной плазменной мишенью приводит к формированию самоподдерживающегося КЭД каскада [1]. Основная особенность, которая позволяет каскаду поддерживать себя, заключается в том, что коллективное

движение частиц образующейся электрон-позитронной плазмы изменяет лазерное поле таким образом, что его магнитная составляющая становится больше электрической, при этом оставаясь перпендикулярной ей. В таких полях частицы дрейфуют вдоль направления распространения лазерного импульса и вращаются в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля, поэтому их траектории представляют собой винтовые линии. Двигаясь по этим линиям, частицы излучают гамма-кванты по направлению мгновенной касательной к траектории. В какие-то моменты времени это направление может быть противоположным направлению распространения лазера. Гамма-кванты, излученные в таком направлении, в конечном итоге покидают электронно-позитронную плазму и попадают в вакуумную область, где присутствует сильное лазерное поле и где они, с большой вероятностью, могут распасться на новые электрон-позитронные пары. Рождаемая пара ускоряется лазерным импульсом обратно в плазменную область, и процесс замыкается. В результате КЭД каскад непрерывно расширяется в сторону лазерного импульса, образуя электрон-позитронную "подушку", по аналогии с процессом распространения фронта ионизации при микроволновом пробое в газе [2].

В работе приводится качественное описание механизма поддержания каскада и аналитическая модель этого процесса. За счёт применения ряда упрощений явным образом записывается самосогласованная система одномерных уравнений гидродинамики, описывающих ключевые процессы, наблюдаемые в ЧВЯ моделировании. Решения данных уравнений качественно хорошо совпадают с результатами ЧВЯ моделирования, что позволяет утверждать, что наше понимание развития КЭД каскада в плоской волне достоверно и применяемые нами упрощения оправданы. Пример сравнения решения модельных уравнений и результатов ЧВЯ моделирования приведён на Рис. 1.

Ожидается, что экспериментальное наблюдение подобных процессов может стать возможным на лазерных установках следующего поколения, поэтому полученные нами результаты могут играть важную роль в приложениях этих установок. Также разработанная модель, возможно, может быть адаптирована для описания астрофизических процессов в магнитосферах нейтронных звёзд, где КЭД каскады обладают сложной пространственно-временной динамикой и также могут сопровождаться формированием плотной электрон-позитронной плазмы.

Работа выполнена при поддержке РНФ (Грант № 20-12-00077) и Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (Грант № 19-1-5-10-1).

$$a_0=2500, \varepsilon_{\gamma,0}=200, \nu=0.32, \mu=10$$

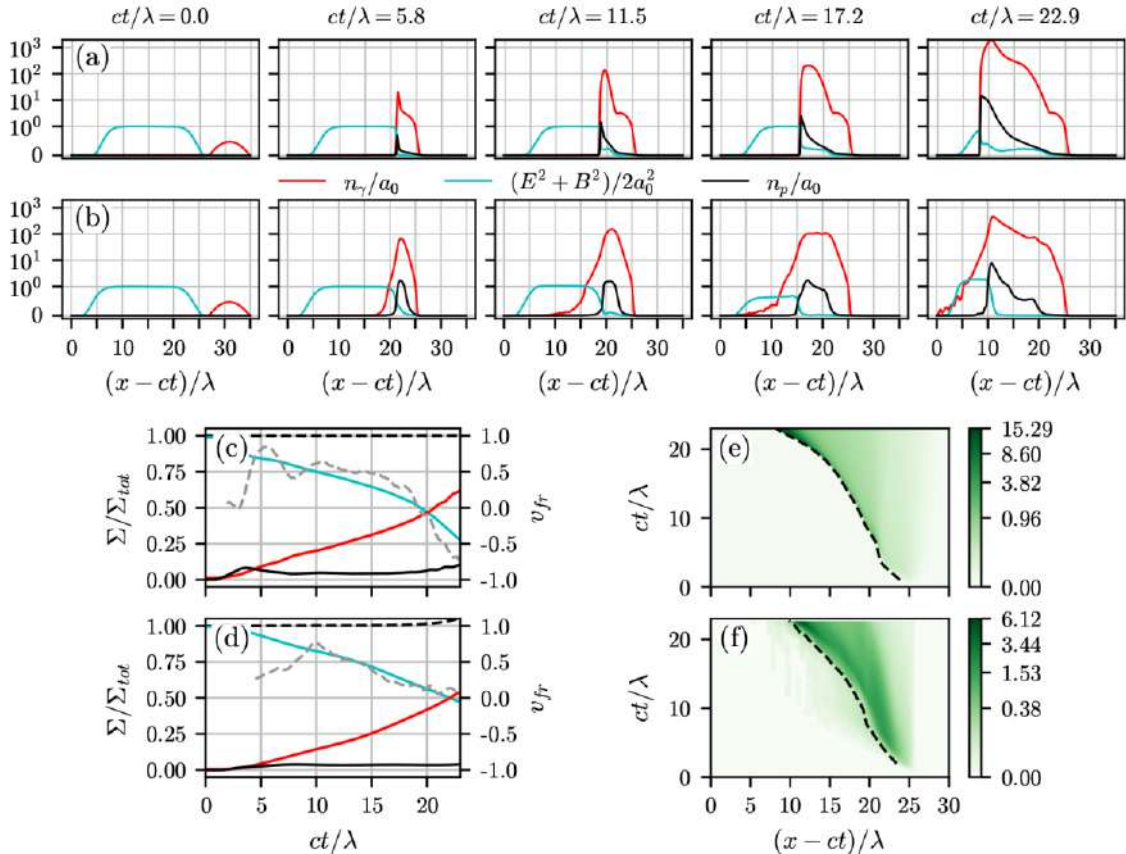


Рис 13. Сравнение решения модельных уравнений (a), (c), (e) и результатов ЧВЯ моделирования (b), (d), (f) с одинаковыми начальными условиями. (a), (b) Распределения плотности

электромагнитной энергии (голубая линия), плотности плазмы (чёрная линия) и плотности гамма-квантов (красная линия). (с), (d) Энергетический баланс: суммарная энергия электрон-позитронных пар (сплошная чёрная линия), гамма-квантов (красная линия) и электромагнитная энергия (голубая линия), нормированные на начальную суммарную энергию (пунктирная чёрная линия); скорость распространения границы каскада (пунктирная серая линия). (е), (f) Распределение электрон-позитронных пар в плоскости $x-t$ (цвет) и положение границы каскада (чёрная пунктирная линия).

Литература

1. A.S. Samsonov, E. N. Nerush, and I. Yu. Kostyukov, Sci. Rep, 9, 11133 (2019).
2. V. E. Semenov, Sov. J. Plasma Phys. 8, 347–350 (1982).

УДК 538.94

Движение активной броуновской частицы в сверхтекучем гелии

А.Д. Легошин¹, Р.Е. Болтнев², М.М. Васильев^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

В отличие от броуновской частицы в классической жидкости движение такой частицы в сверхтекучем гелии существенно зависит от наличия квантовых вихрей [1]. Известно, что когерентное вращение сверхтекучей компоненты вокруг кора вихря приводит к эффективному захвату примесных частиц вихрями [2]. В этом случае частица либо движется исключительно вдоль кора вихря, либо, если возмущения жидкости достаточно велики, только часть времени проводит в свободном движении между захватами в вихри.

Ситуация качественно изменяется если частица в сверхтекучем гелии оказывается активной, т.е. способной поглощать энергию извне. При достаточно интенсивном тепловыделении частицы у её поверхности формируется противоток нормальной (вязкой) и сверхтекучей компонент, в котором формируются вихри, плотность которых определяется взаимной скоростью нормальной и сверхтекучей компонент, т.е. интенсивностью тепловыделения [3]. Такая частица способна взаимодействовать уже и со сверхтекучей компонентой [4]. Данная работа посвящена исследованию движения активных броуновских частиц в трёхмерном пространстве. В качестве активных частиц были использованы сверхпроводящие частицы с характерным размером 40 мкм, левитирующие в поле магнитной ловушки и облучаемые интенсивным лазерным излучением ($\sim$ Вт/см²).

Работа выполнена в ОИВТ РАН при поддержке РНФ (проект №20-12-00372).

Литература

1. Jin D., Maris H.J. A Study of the Motion of Particles in Superfluid Helium-4 and Interactions with Vortices // J. Low Temp. Phys. 2011. V. 162. P. 329–339.
2. Mateo D., Eloranta J., Williams G.A. Interaction of ions, atoms, and small molecules with quantized vortex lines in superfluid 4He // J. Chem. Phys. 2015. V. 142. P. 064510.
3. Inui S., Tsubota M. Spherically symmetric formation of localized vortex tangle around a heat source in superfluid 4He // Phys. Rev. B. 2020. V. 101. P. 214511.
4. Penney R., Hunt T.K. Particle Motion and Heat-Exchange "Viscosity" in Superfluidity Helium // Phys. Rev. 1968. V. 169. P. 228.

УДК 533.924

Динамика и формирование структур микронных и субмикронных частиц в результате ионного распыления мишени в плазме тлеющего разряда постоянного тока

Д.Б. Ефименко¹, Е.А. Кононов^{1,2}, М.М. Васильев^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}

¹ Объединённый институт высоких температур РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Исследованию свойств образований из заряженных пылевых частиц в газовом разряде посвящено большое число экспериментальных и теоретических работ. Такие исследования актуальны как с фундаментальной точки зрения, так и в связи с развитием различных приложений, т.к. практически при любых технологических процессах с генерацией плазмы существует проблема взаимодействия плазма-стенка или плазма-электрод, при которых в плазмообразующий буферный газ попадают примесные ионы, кардинальным образом меняющие ее свойства. При этом, характеристики газового разряда могут сильно зависеть даже от очень небольшой концентрации легкоионизируемой примеси.

В данной работе представлены результаты экспериментального исследования процесса распыления материала мишени (специальной вставки) под влиянием бомбардировки ионами рабочего газа, и формирование плазменно-пылевых структур из частиц нанометрового и микронного размера в газовом разряде в процессе распыления. Экспериментально получены условия роста микрочастиц и формирования структур в газовом разряде. Сделаны оценки скорости распыления вставки и потока нанокластеров. Получены концентрации и средние кинетические энергии частиц различных фракций.

УДК 533.922

Динамика характеристик электронных и позитронных пучков в лазерно-плазменном ускорителе

Д.В. Пугачёва^{1,2}, Н.Е. Андреев^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Разработка новых лазерно-плазменных методов ускорения электронов и позитронов представляет большой интерес, поскольку они могут послужить основой для новых компактных многостадийных ускорителей до сверхвысоких энергий, недостижимых другими методами с использованием классических радиочастотных ускорителей [1, 2]. В частности, для проведения прецизионных тестов Стандартной модели необходимы высококачественные пучки поляризованных электронов и позитронов ТэВ диапазона энергий [3, 4]. В ходе данной работы разработанный и протестированный гибридный вычислительный код [5], сочетающего в себе как PIC - методы, так и сеточные методы, был адаптирован для моделирования процесса ускорения в отдельных стадиях лазерно-плазменного коллайдера не только релятивистских электронов, но и позитронов. Получена оценка параметров многостадийной схемы ускорителя, необходимых для получения встречных пучков с заданными характеристиками, а также проведено исследование динамики этих характеристик в процессе ускорения.

Работа выполнена в рамках проекта «Лазерно-плазменные ускорители ультрарелятивистских электронов и позитронов» № 19-02-00908-А Российского Фонда Фундаментальных Исследований

Литература

1. Weikum M.K. [et al.] EuPRAXIA—a compact, cost-efficient particle and radiation source //AIP Conference Proceedings. 2019. V. 2160. N. 1. P. 040012.
2. Cros B. Compact coupling for a two-stage accelerator //Nature. 2016. V. 530. N. 11. P. 165
3. Vieira J. [et al.] Polarized beam conditioning in plasma based acceleration //Phys. Rev. ST Accel. Beams. 2011. V. 14. P. 071303
4. Schroeder C.B. [et al.] Physics considerations for laser-plasma linear colliders //Phys. Rev. ST Accel. Beams. 2010. V. 13. P. 101301
5. Pugacheva D.V., Andreev N.E. Effect of synchrotron radiation on the dynamics of electron spin precession in the process of laser-plasma acceleration //Quantum Electronics. 2018. V. 48. N. 4. P. 291

Исследование процессов энергетического обмена в двухслойных системах неидентичных заряженных частиц

С.В. Кауфман¹, О.С. Ваулина²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

В настоящей работе проведено исследование процессов энергетического обмена в диссипативных системах неидентичных взаимодействующих частиц с неоднородным распределением источников тепла и/или любых других источников стохастической кинетической энергии. Рассмотрена теоретическая модель для анализа энергетического баланса в таких системах, описывающая перераспределение стохастической кинетической энергии между двумя неидентичными частицами разных размеров, зарядов и температур.

Изучены условия энергетического обмена в двухслойных ансамблях с двумя разделенными фракциями неидентичных частиц. Выполнен численный анализ процессов перераспределения стохастической энергии между разными фракциями частиц, имеющих различную температуру, в таких системах. Рассмотрено перераспределение стохастической энергии по степеням свободы.

Полученные результаты не зависели от числа частиц (при $N \geq 100$). Величина перераспределяемой энергии была пропорциональна разнице температур различных фракций и/или температур по различным степеням свободы и определялась отношением характерных частот в исследуемых системах.

Результаты настоящей работы применимы для систем с любым типом попарных (взаимных) взаимодействий и могут быть полезны для анализа энергетического обмена в неоднородных системах, которые представляют интерес в физике плазмы, физике полимеров и коллоидных систем.

Литература

1. О. С. Ваулина, О. Ф. Петров, В. Е. Форттов, А. Г. Храпак, С. А. Храпак, Пылевая плазма (эксперимент и теория), Физматлит, Москва (2009).
2. Complex and Dusty Plasmas, ed. by V. E. Fortov and G. E. Morfill, CRC Press (2010).

Исследование спектральных характеристик стохастического движения макрочастиц в плазменно-пылевых цепочечных структурах

Э.А. Саметов^{1,2}, Е.А. Лисин^{1,2}, Е.А. Кононов^{1,2}, О.С. Ваулина^{1,2}, М.М. Васильев^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}

¹ Объединённый институт высоких температур РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В последнее время появилось немало работ, посвященных, так называемому, «нарушению» симметрии взаимодействия. Такое формальное невыполнение третьего закона Ньютона, может возникнуть, например, когда рассматривается подсистема частиц в среде, при этом сама среда учитывается опосредовано – через потенциал межчастичного взаимодействия, диссипативные силы, а также как источник кинетической энергии частиц. Ярким примером таких систем являются некоторые виды коллоидов [1-3] и пылевой плазмы [4-7]. Их изучение, помимо фундаментальных аспектов, представляет особый интерес для нано- и микро-технологических применений.

Нарушение симметрии сил межчастичного взаимодействия удобно изучать на примере двухчастичной системы, поскольку не требуется рассмотрение коллективных эффектов. Чтобы иметь возможность исследовать ионный след, являющийся причиной нарушения симметрии, который образуется под частицами в потоке ионов, частицы должны быть расположены одна под другой. В такой конфигурации нижняя частица представляет собой зонд для измерения кильватерных сил межчастичного взаимодействия. Один из недостатков таких систем состоит в том, что они не позволяют нам изучать продольное распределение кильватерного поля, возникающего за пылевой частицей в анизотропной плазме. Одним из решений этой проблемы является использование многочастичной цепочки пылевых частиц.

В данной работе представлен новый экспериментальный метод, основанный на анализе спектральной плотности случайных процессов, позволяющий изучать невязимные эффективные силы взаимодействия между частицами в неравновесных средах. В отличие от предыдущих исследований, этот метод не требует специальной модернизации экспериментальной установки, внешних возмущений системы, предварительных измерений внешних полей или каких-либо предположений относительно типа взаимодействия.

Предложенный метод использовался для восстановления производных сил межчастичного взаимодействия и внешнего электрического поля, а также диссипативных сил, действующих на частицы в квазиодномерных диссипативных цепочечных системах, путем решения обратной задачи о спектральной плотности случайных процессов, действующих в анализируемой системе. Аппроксимация экспериментально измеренных спектральных плотностей с использованием аналитических уравнений позволила определить производные удельных сил взаимодействия и удельных внешних электромагнитных сил. Во всем диапазоне параметров разряда эффективное взаимодействие между частицами было невязимным.

Данная работа была поддержана Российским Научным Фондом (грант № 19-12-00354).

Литература

1. *Dzubiella J., Löwen H., Likos C.N.* Depletion forces in nonequilibrium // *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 91. P. 248301.
2. *Sabass B., Seifert U.* Efficiency of surface-driven motion: Nanoswimmers beat microswimmers // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 105. P. 218103.
3. *Kryuchkov N.P., Ivlev A.V., Yurchenko S.O.* Dissipative phase transitions in systems with nonreciprocal effective interactions // *Soft Matter*. 2018. V. 14. P. 9720.
4. *Schweigert V.A., Schweigert I.V., Melzer A., Homann A., Piel A.* Plasma crystal melting: a nonequilibrium phase transition // *Phys. Rev. Lett.* 1998. V. 80. P. 5345.
5. *Chaudhuri M., Ivlev A.V., Khrapak S.A., Tomas H.M., Morfil G.E.* Complex plasma—the plasma state of soft matter // *Soft Matter*. 2011. V. 7. P. 1287.
6. *Lisina I.I., Vaulina O.S.* Formation of layered structures of particles with anisotropic pair interaction // *EPL*. 2013. V. 103. P. 55002.
7. *Nosenko V., Ivlev A.V., Kompaneets R., Morfil G.* Stability and size of particle pairs in complex plasmas // *Phys. Plasmas*. 2014. V. 21. P. 113701.

УДК 533.9.082.76

Исследование энергетического распределения ионов плазмы отражательного разряда с дополнительной термоэмиссией многосеточным анализатором

С.Б. Ветрова^{1,2}, Н.Н. Антонов², Г.Д. Лизякин²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединенный институт высоких температур РАН

Одним из возможных способов переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) является метод плазменной сепарации [1,2]. Текущая работа связана с разработкой концепции плазменного сепаратора с потенциальной ямой [3,4]. В установке, заполненной буферной плазмой, воспроизводятся скрещенные электрическое и магнитное поля и производится инжекция плазмы сепарируемого вещества (см. рис. 1). Движение ионов буферной плазмы в камере сепарации состоит из вращения в скрещенных полях и движения вдоль оси установки. Целью данного исследования было измерить энергетическое распределение ионов плазмы буферного отражательного разряда при их движении вдоль оси камеры. Для этого был сконструирован многосеточный анализатор [5]. Параметры устройства, такие как расстояние между электродами и размер ячейки сетки, были подобраны по результатам теоретических оценок и предварительного моделирования поведения частиц внутри зонда.

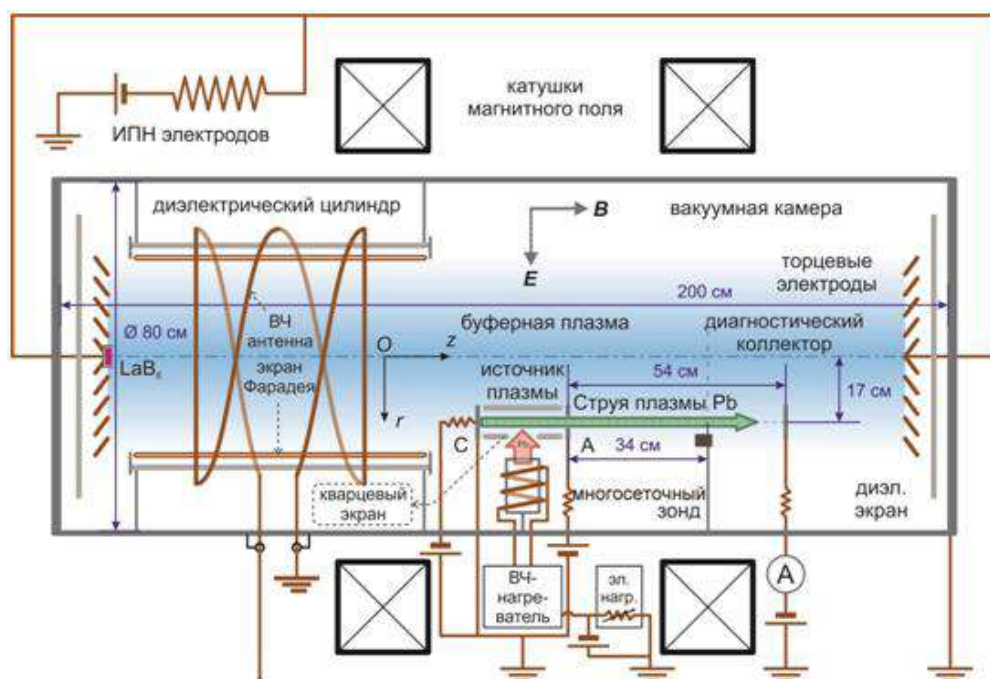


Рис.1 Схема экспериментальной установки для плазменной сепарации модельных веществ.

Измерительная головка сконструированного анализатора имеет габариты 20x15 мм, корпус прибора выполнен из нержавеющей стали. Стальные сеточные электроды выполнены из проволоки диаметром 32 мкм, размер ячейки сетки равен 64 мкм. Расстояние между соседними сетками составляет 0,6 мм, полезная площадь каждого электрода равна 20 мм². Измерения энергетического распределения проводились в условиях отражательного разряда в атмосфере аргона с дополнительной термоэмиссией. Характерные величины давления и магнитного поля в камере, а также потенциала торцевых электродов в эксперименте равны 0,3 мТорр, 1 кГс и -500 В соответственно. Концентрация электронов плазмы составляет порядка 10¹¹ см⁻³, плазменный потенциал – -150 В. Корпус многощеточного зонда и входной электрод находятся под плавающим потенциалом, в эксперименте принимающим значения порядка -170 В. Напряжение на разрывающем и анализирующем электродах и коллекторе задается относительно плавающего потенциала и равно -100 В, 0...100 В и 0 В соответственно. На рис. 2 изображены полученные в ходе исследования распределения ионов отражательного разряда по энергиям для двух различных значений потенциалов торцевых электродов.

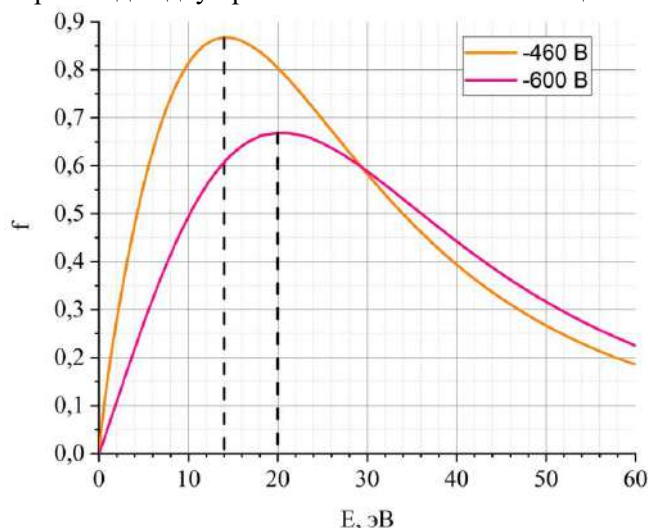


Рис.2 Экспериментально полученные энергетические распределения ионов отражательного разряда при различных потенциалах торцевых электродов.

Полученные данные позволяют определить среднюю энергию движения ионов отражательного разряда вдоль оси камеры и могут быть использованы в расчётах траекторий частиц в сепарационной камере. Исследовательский интерес представляет проведение измерений в более широком

диапазоне параметров отражательного разряда, а также исследование других компонент движения ионов, в частности, скорости их вращения в скрещенных полях.

Литература

1. Долголенко Д.А. и Муромкин Ю.А. О разделении смесей химических элементов в плазме // Успехи физических наук. 2017. Т. 187. №10. С. 1071.
2. Zweben S.J., Gueroult R. and Fisch N.J. Plasma mass separation // Physics of plasmas. 2018. V. 25.
3. Ворона Н.А., Гавриков А.В., Самохин А.А., Смирнов В.П. и Хомяков Ю.С. О возможности переработки ОЯТ и РАО плазменными методами // Ядерная физика и инжиниринг. 2014. Т. 5. №11-12. С. 944.
4. Liziakin, G. D., Gavrikov, A. V., Murzaev, Y. A., Usmanov, R. A. and Smirnov, A. P. Parameters influencing plasma column potential in a reflex discharge // Physics of Plasmas. 2016. V. 23.
5. Simpson J.A. Design of retarding fields energy analyzers // The Review of Scientific instruments. 1961. V. 32.

УДК 537.533.9

Кумуляция плотности энергии сильноточного электронного пучка в вакуумном диоде со взрывоэмиссионным катодом

В.В. Нгуен, В.И. Олешко, Е.В. Янкина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Сильноточные электронные пучки (СЭП) наносекундной длительности широко используются в современных технологиях и фундаментальных физических исследованиях. Важной особенностью СЭП является их способность к самофокусировке и, как следствие, к кумуляции плотности энергии в конденсированных средах. К настоящему времени опубликовано значительное число работ, посвященных изучению эффекта самофокусировки релятивистских электронных пучков (РЭП), ток которых превышает ток Альфвена: $I_A \geq 20$ кА [1]. Что касается физической природы явлений филаментации и самофокусировки СЭП, с током < 20 кА, то эти процессы менее изучены и требуют дополнительных исследований. Стимулом для проведения таких исследований является общенаучный интерес к двум проблемам – необходимостью изучения поведения твердых тел при высоких плотностях энергии и получением новых данных о таких явлениях, как самофокусировка и филаментация СЭП в вакуумных диодах со взрывоэмиссионным катодом.

В [2] нами было установлено, что в зоне самофокусировки СЭП, формируемого в электронном ускорителе с генератором ГИН-600, объемная плотность энергии достигает $\approx 10^9$ Дж/м³, что приводит к испарению облучаемой поверхности медной мишени и образованию откола на ее тыльной поверхности. К настоящему времени предложено несколько физических моделей, объясняющих эффекты самофокусировки и филаментации СЭП с током ~ 1 кА [2-4]. Однако ни одна из них не объясняет весь набор, полученных экспериментальных результатов, что требует проведения дополнительных исследований.

Цель настоящей работы – определить временные и энергетические параметры самосфокусированного СЭП, выведенного за анод вакуумного диода.

Эксперименты проводились на импульсном ускорителе электронов с генератором ГИН-600 ($E_{\max} \approx 390$ кэВ, $I_{\max} \approx 2$ кА, $\tau_{0,5} \approx 12$ нс) к которому подключался вакуумный диод, образованный трубчатым катодом и плоским анодом (рис. 1).

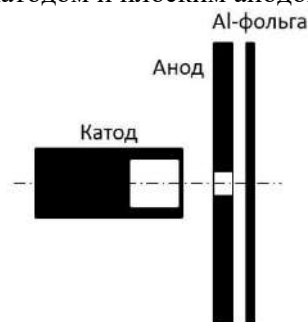


Рис. 1. Геометрия вакуумного диода.
 $R = 3$ мм; $d_{ka} = (2,5-6)$ мм



Рис. 2. Фотография автографа, образованного на поверхности медного анода за один импульс облучения. Диаметр эрозийной фигуры 7 мм

Аспектное отношение $g = R/d$ (где R — радиус катода, d — межэлектродный зазор) варьировалось в диапазоне 0,4–1,2. Эффект самофокусировки наблюдался при $g = 1,2$ и величине катод-анодного зазора ($d_{ка} = 2,5$ мм) исследовался по следам эрозии на анодных пластинах из различных металлов «автографам» электронного пучка с помощью оптической микроскопии. Ток электронного пучка, прошедший через отверстие диаметром $\sim 1,5$ мм, (предварительно изготовленном в аноде в центре пятна самофокусировки), измерялся с помощью коллектора, состоящего из металлического конуса, образующего с корпусом линию с волновым сопротивлением 50 Ом. Коллектор устанавливался за алюминиевой фольгой, толщиной 30 мкм, отделяющей вакуумный диод от атмосферного воздуха. Длительность импульса тока на полувысоте варьировалась с помощью срезающего разрядника от 12 до 2 нс. Для регистрации сигналов с коллектора использовался цифровой осциллограф DPO 3034 (300 MHz). Временное разрешение системы регистрации составляло ~ 2 нс.

На рис. 3 приведены осциллограммы тока самосфокусированного электронного пучка, прошедшего через отверстие в аноде ($\varnothing \approx 1,5$ мм), предварительно изготовленного в фокусе электронного пучка. Пучок электронов выводился в атмосферу через алюминиевую фольгу, толщиной 30 мкм. На осциллограмме рис. 3 (1) видны четыре пика с общей длительностью ~ 20 нс, которые образуются из-за рассогласования диода с формирующей линией. Максимальная энергия электронов в четырех пиках была оценена по поглощению в алюминиевых фольгах. Осциллограммы самосфокусированного электронного пучка (1-3), приведенные на рис.3, соответствуют токам пучка, прошедшего через установленные на его пути поглощающие фольги, толщиной, 30, 130 и 230 мкм, соответственно. Установлено, что четвертый пик тока исчезает при суммарной толщине фольги $d_{Al} \sim 150$ мкм, третий ~ 200 , второй ~ 230 мкм и первый ~ 280 мкм, что соответствует максимальной энергии электронов 200, 230, 250 и 290 кэВ. Сравнение осциллограмм тока, полученных в режиме самофокусировки (Рис. 3, $d_{ка} = 2,5$ мм) с осциллограммами тока, измеренными при $d_{ка} = 6$ мм (рис. 4) свидетельствуют о том, что электроны, формирующие центральное пятно самофокусировки в основном имеют среднюю энергию ~ 100 кэВ, которые формируются на «хвосте» импульса электронного пучка.

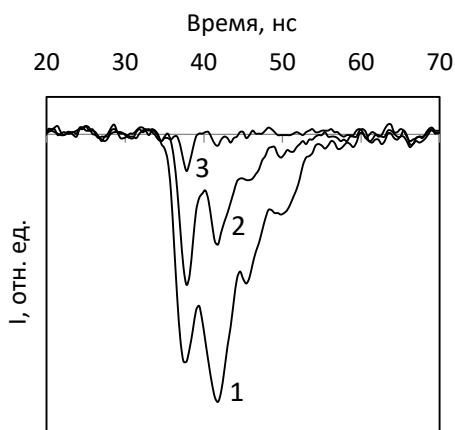


Рис. 3. Осциллограммы тока самосфокусированного электронного пучка ($d_{ка} = 2,5$ мм), прошедшего через алюминиевые фольги толщиной: 1 – 30; 2 – 130; 3 – 230 мкм

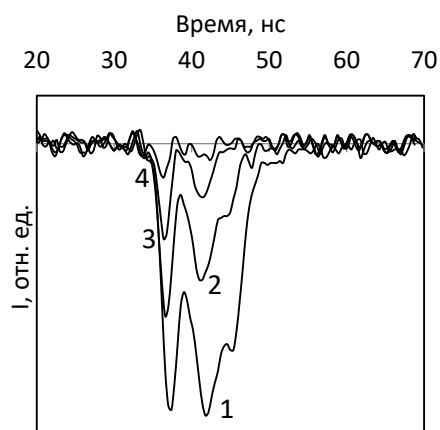


Рис. 4. Осциллограммы тока электронного пучка, сформированного в вакуумном диоде с сетчатым анодом ($d_{ка} = 6$ мм), прошедшего через алюминиевые фольги толщиной: 1 – 30; 2 – 130; 3 – 230; 4 – 300 мкм

Литература

1. Тарумов Э.Э. Получение и фокусировка сильноточных релятивистских электронных пучков в диодах // Генерация и фокусировка сильноточных релятивистских электронных пучков / Под ред. Л.И. Рудакова. М.: Энергоатомиздат, 1990. С. 122–181.
2. Олешко В.И., Тарасенко В.Ф., Бураченко А.Г., Nguyen V.V. Филаментация и самофокусировка электронных пучков в вакуумных и газовых диодах // Письма в ЖТФ. 2019. Т. 45. В. 7. С. 3-7.
3. Anishchenko S., Baryshevsky V., Belous N., Gurinovich A., Gurinovich E., Gurnevich E., Molchano P. Cumulation of High-Current Electron Beams: Theory and Experiment // IEEE Trans. Plasma Sci. 2017. V. 45. No. 10. P. 2739-2743.
4. Baryshnikov V.I., Paperny V.L., Shipayev I.V. Collective acceleration of ions in picosecond pinched electron beams // J. Phys. D: Appl. Phys. 50. 2017. 425206.

Лазерно-индуцированное активное броуновское движение, содержащее феррофлюид капель эмульсии.

А.С. Лисицын^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}, М.М. Васильев^{1,2}, Е.А. Кононов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Активные броуновские частицы — это биологические или искусственно созданные микро- или наноразмерные частицы, которые способны к самопередвижению (англ. self-propelling) за счет преобразования энергии извне в энергию собственного движения. В качестве систем активных частиц могут выступать как различные природные объекты: микроорганизмы, бактерии, так и суспензии, капли эмульсий и другие искусственные системы. Эмульсии являются одним из основных видов коллоидных систем и представляют собой взвесь жидких частиц (капель) в жидкости. Активные коллоидные системы могут проявлять такие свойства как понижение вязкости, повышение самодиффузии, что не характерно свойствам равновесных систем.

В представленной работе экспериментально исследовалось движение капель вазелинового масла, содержащих частицы магнетита Fe₃O₄ при воздействии лазерного излучения. Было выполнено сравнение динамических характеристик таких капель с движением эмульсий капель без частиц Fe₃O₄ при воздействии лазерного излучения. Эксперименты проводились на базе комплекса микрофлюидики (Dolomite), который предназначен для получения монодисперсных капель эмульсии различного типа. Для воздействия на капли эмульсии и анализа траекторий движения применялась лазерная система и оптический стереомикроскоп (Olympus SZX16).

Экспериментально наблюдалось движение капель масла полидисперсных частиц масла, содержащие частицы магнетита, при воздействии лазерного излучения. В то же время, движение монодисперсных капель масла без частиц под воздействием лазерного излучения той же мощности не наблюдалось.

Литература

1. Арансон И.С. Активные коллоиды // Успехи физических наук 2013 Том 183, №1, стр 87
2. Bechinger C., Leonardo R., Lowen H., Reichhardt C., Volpe G. Active Particles in Complex and Crowded Environments // Reviews of modern physics 2016 V. 88, P. 1

Масс-спектрометрическая диагностика оксид-содержащей плазмы диффузной вакуумной дуги

А.Д. Мельников^{1,2}, Р.А. Усманов², В.П. Полищук², Н.Н. Антонов², А.В. Гавриков²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Основной целью данной работы являлось экспериментальное исследование ионного состава плазмы диффузной вакуумной дуги на катоде из диоксида церия при различных параметрах источника плазмы. Диффузная вакуумная дуга (ДВД) рассматривается в качестве источника плазмы разделяемых элементов для задачи плазменной сепарации отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) [1-2]. Проблема разработки метода очистки ОЯТ от продуктов распада остро стоит перед атомной промышленностью. Это связано с необходимостью замыкания топливного цикла и повышения эффективности использования ядерного топлива [3]. Технологический процесс в существующих методах переработки ОЯТ сопряжен с возникновением радиоактивных отходов, что значительно ограничивает возможность их промышленного применения. В виду этого ведутся исследования по поиску альтернативных способов ресайклинга ядерного топлива. Одним из них может стать метод плазменной сепарации. Диоксид церия в ходе работ по разработке этого метода используется в качестве модельного вещества, симулирующего поведение диоксида урана в плазменном состоянии.

Испарение диоксида церия неконгруэнтно, что следует из модельной фазовой диаграммы [4-5]. Следствием этого является выделение большого количества кислорода при нагреве. В совокупности с кислородом, появляющимся в плазме в результате диссоциации молекул CeO_2 , это может значительно влиять на свойства разряда. В частности, могут развиваться неустойчивости из-за возникновения отрицательных ионов.

Ионный состав плазмы ДВД определялся при помощи методов времяпролетной масс-спектрометрии. Для этого был разработан и создан времяпролетный масс-анализатор. Схема работы прибора была предложена в работе [6]. Для проведения измерений непрерывного потока плазмы тяжелых металлов она была модифицирована. Фокусировка потока ионов осуществлялась с использованием линз энзеля [7]. Коллектором являлась плоская металлическая пластина. Регистрация сигнала ионов осуществлялась осциллографированием напряжения на нагрузочном резисторе. Для повышения чувствительности детектирования сигнал аналогового усиливался.

Экспериментальный стенд [8] представлял собой цилиндрическую вакуумную камеру объемом $\sim 1 \text{ м}^3$. Давление остаточных газов составляло порядка 10^{-5} Па. Разряд генерировался в вертикально ориентированном катод-анодном промежутке шириной 3 см. Плазмообразующей средой являлись пары катода, помещенного в подогреваемый молибденовый тигель. Температура тигля контролировалась при помощи яркостного пирометра. Вход в масс-спектрометр располагался за анодом на расстоянии 0.2 м. Таким образом анализировалась плазма, вышедшая в заанодное пространство через отверстие в аноде. Режим работы источника определялся в первую очередь током дуги, а также напряжением дуги и температурой катода. В ходе экспериментов эти параметры варьировались в следующих пределах: ток дуги – 38-98 А, напряжение дуги – 10-13 В, температура катода – 2050-2300 К.

Полученные масс-спектры представлены на рисунке 1. Видно, что основными компонентами в плазме являются однократные ионы Ce^+ и CeO^+ . Кроме того, наблюдаются ионы O^+ , Mo^+ , Ce^{++} , CeO^{++} и CeO_2^+ . Сдвиг ионного состава в сторону однократных ионов Ce и CeO может быть связан с величинами энергий ионизации ($\text{Ce} - 5.5 \text{ эВ}$, $\text{CeO} - 5.0 \text{ эВ}$, $\text{Mo} - 7.1 \text{ эВ}$, $\text{CeO}_2 - 9.7 \text{ эВ}$, $\text{O}_2 - 13.6 \text{ эВ}$). Кроме того, существенен процесс диссоциации молекул CeO_2 , так как он во многом определяет соотношение молекул и атомов Ce, CeO, CeO_2 в паре. Реализация того или иного состава определяется совокупным влиянием процессов ионизации, диссоциации и испарения, скорость каждого из которых зависит от основных параметров источника плазмы. Отметим, что в ходе экспериментов наблюдались неустойчивости разряда, выражавшиеся в колебаниях напряжения дуги, а также в нестационарном характере свечения плазмы. Для исключения этого фактора, влияющего на состав, производилось усреднение по времени. Таким образом были осуществлены масс-спектрометрические измерения, определены компоненты ионного состава плазмы и их относительное содержание.

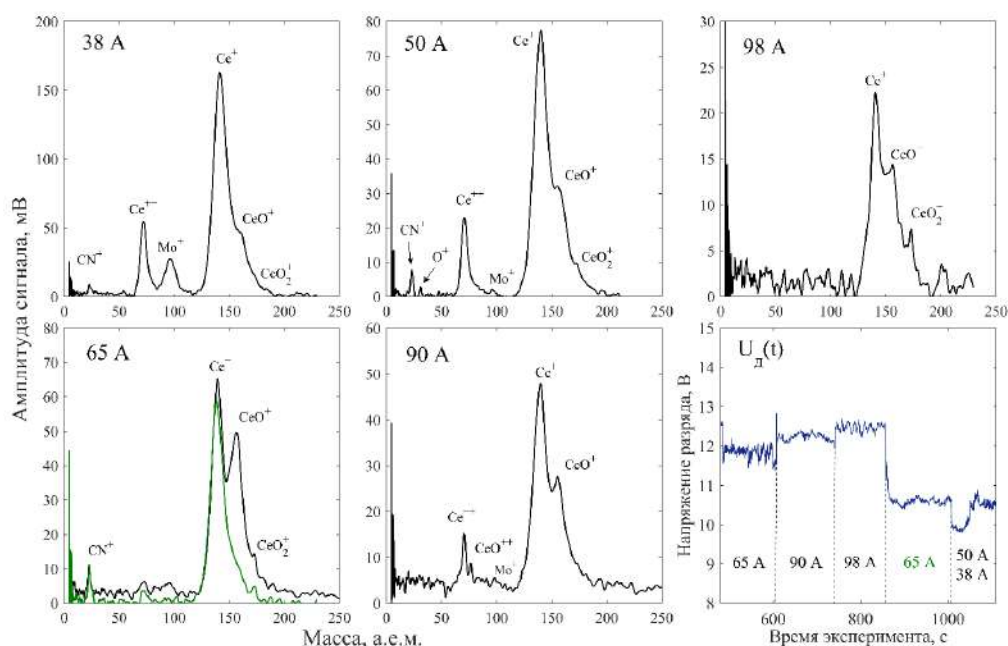


Рис.1. Зарегистрированные масс-спектры плазмы диоксида церия в разных режимах диффузной вакуумной дуги и изменение напряжения дуги во время эксперимента. Зеленым выделен режим с преобладающим содержанием в плазме однократных ионов церия.

Литература

1. Vorona N.A., Gavrikov A.V., Samokhin A.A., Smirnov V.P., and. Khomyakov Y.S On the possibility of reprocessing spent nuclear fuel and radioactive waste by plasma methods // Phys. At. Nucl. V. 78. №. 14. P. 1624–1630. 2015.
2. Муромкин Ю. А. Долголенко Д.А. О разделении смесей химических элементов // УФН. Т. 187. №. 10. 2017.
3. Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом» Итоги деятельности за 2018 год. 2018.
4. Zinkevich M., Djurovic D., and Aldinger F. Thermodynamic modelling of the cerium-oxygen system // Solid State Ionics. V. 177. №. 11–12. P. 989–1001. 2006.
5. Okamoto H. Ce-O (Cerium-Oxygen) // J. Phase Equilibria Diffus. V. 29. №. 6. P. 545–547. 2008.
6. Wiley W. C. and McLaren I. H. Time-of-flight mass spectrometer with improved resolution // Rev. Sci. Instrum. V. 26. №. 12. P. 1150–1157. 1955.
7. Krivit S.B., Lehr J.H., and Kingery T.B. Electric and Magnetic Field Lenses // Nucl. energy Encycl. Sci. Technol. Appl. P. 108–136. 2011.
8. Usmanov R.A. et al. Diffuse vacuum arc with heated cathode made of ceramic (CeO₂) and metal (Cr) mixture // Plasma Sources Sci. Technol. V. 29. P. 015004. 2020.

УДК 533.922

Параметры ультрарелятивистских электронов, генерируемых при взаимодействии субпетаваттного лазерного импульса с плазмой околокритической плотности

В.С. Попов², Н.Е. Андреев^{1,2}, О.Н. Розмей^{3,4}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

³GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH

⁴Goethe University

В настоящей работе приведены результаты трехмерного PIC (“particle-in-cell”) моделирования процесса взаимодействия суб-петаваттного суб-пикосекундного лазерного импульса с многокомпонентной плазмой с околокритической плотностью электронов. Параметры лазера и мишени соответствуют недавно проведенным экспериментам на установке PHELIX [1]. В эксперименте [1] лазерный импульс с основной длиной волны 1.053 мкм направляли на мишени под углом $5 \div 7$ градусов к нормали к мишени. Длительность лазерного импульса составляла 750 ± 250 фс. В качестве мишеней использовались полимерные пены C₁₂H₁₆O₈ толщиной 300–500 мкм. Созданная плазма имела электронную плотность 7×10^{20} см⁻³ или $0.65n_{cr}$ (критическая плотность электронов $n_{cr} = m_e \omega_0^2 / (4\pi e^2)$, где e - заряд электрона, m - масса покоящегося электрона; c - скорость света; ω_0 - лазерная частота). Моделирование взаимодействия лазерного излучения с плазмой околокритической плотности электронов проводилось с помощью трехмерного полностью релятивистского PIC кода VLPL [2] для параметров лазера и геометрии взаимодействия, использованных в эксперименте. Интенсивность лазерного импульса с длиной волны $\lambda = 1$ мкм, во времени и пространстве была аппроксимирована гауссовским распределением. Эллиптическая форма распределения интенсивности в фокальном пятне соответствовала измеренной в эксперименте с FWHM осями 11 мкм в вертикальном и 15 мкм в горизонтальном направлениях. Энергия лазерного импульса в FWHM фокальном пятне составляла 17.5 Дж и FWHM длительность импульса 700 фс, что отвечает интенсивности лазера 2.5×10^{19} Вт/см² при $a_L = 4.28$. Однородная плазма состояла из электронов с концентрацией $n_e = 0.65n_{cr}$ и полностью ионизированных ионов углерода, водорода и кислорода. Моделирование учитывало тип иона и ионную фракцию в соответствии с химическим составом триацетатцеллюлозы (C₁₂H₁₆O₈). Моделирование показало, что при воздействии петаваттного лазерного импульса на мишень околокритической плотности он самофокусируется, и под действием пондеромоторной силы происходит почти полное выталкивание электронов в направлении, поперечном по отношению к распространению лазерного импульса. Образуется канал с пониженной концентрацией электронов, который испытывает изгибающую неустойчивость и филаментацию на поздних этапах распространения лазерного импульса. Электроны захватываются внутри плазменного канала и ускоряются до ультрарелятивистских энергий под действием механизма прямого лазерного ускорения (Direct Laser Acceleration, DLA) [3]. Важной особенностью такого механизма ускорения является узкая направленность ускоренных электронов вдоль направления распространения лазерного импульса с углом расходимости пучка электронов, определяемым поперечным импульсом бета-

тронных колебаний электронов в плазменном канале. На Рис. 1 приведен полученный в моделировании энергетический спектр всех электронов, вылетевших из мишени за время взаимодействия $t = 2.4$ пс. Характерная температура ультрарелятивистских электронов, определенная с помощью аппроксимации спектра максвелловским распределением (изображенным на Рис. 1 синей пунктирной линией) составляет ~ 10 МэВ. Измеренная в эксперименте под углом 0° эффективная температура (см. Рис. 4 в [1]) составляет 12 МэВ, что хорошо согласуется с указанным на Рис. 1 значением 10 МэВ.

Работа выполнена при поддержке Проекта РФФИ № 20-21-00150 и Госкорпорации «Росатом».

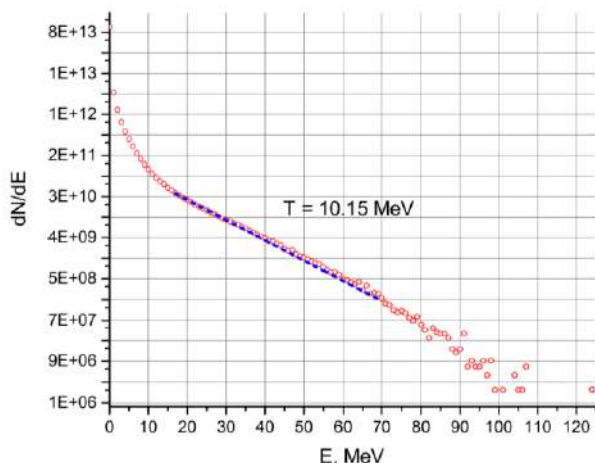


Рис. 1. Полученный в моделировании спектр всех вылетевших электронов за время $t = 2.4$ пс. Аппроксимация спектра максвелловским распределением показана синей пунктирной линией.

Литература

1. Rosmej O.N., Gyrdaymov M., Günther M.M., Andreev N.E., Tavana P., Neumayer P., Ziahter S., Zahn N., Popov V.S., Borisenko N.G., Kantsyrev A., Skobliakov A., Panyushkin V., Bogdanov A., Consoli F., Shen X. F. and Pukhov A. // Journal of Plasma Physics. 1999. V. 61. P. 425 – 433
2. Pukhov A. // Journal of Plasma Physics. 1999. V. 61. P. 425 – 433
3. Pukhov A., Sheng Z. M. and Meyer-ter Vehn // J Physics of Plasmas. 1999. V. 6. P. 2847–2854

УДК 536.7

Первопринципное исследование высокотемпературных свойств циркония в твердом и жидком состояниях

М.А. Парамонов^{1,2}, Д.В. Минаков^{1,2}, П.Р. Левашов^{1,2}

¹Объединенный институт высоких температур РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Знание высокотемпературных теплофизических свойств материалов атомной энергетики, их уравнений состояния, крайне необходимо для анализа ядерной безопасности атомных реакторов, эксплуатируемых в настоящее время или планируемых к эксплуатации в будущем, в том числе для моделирования поведения атомных энергетических установок при критических воздействиях; прогнозирования условий, которые могут привести к тяжелым техногенным авариям; анализа их последствий.

Метод импульсного нагрева проводников позволяет получить свойства в той высокотемпературной области, которая недостижима для стационарных исследований. Однако интерпретация результатов таких экспериментов затруднена в виду скорости и сложности протекающих физических явлений, а экспериментальные данные, получаемые разными авторами, зачастую значительно различаются.

Цирконий является одним из основных конструкционных материалов ядерных энергетических установок. Однако его свойства в жидкой фазе до сих пор известны лишь приблизительно. Так плотность жидкого циркония в точке плавления, измеренная разными авторами, отличается почти

на 10%. Расхождение в оценках наклона кривой теплового расширения почти двукратное. Оценки критической температуры также разнятся почти в два раза.

В то же время, первопринципный метод квантовой молекулярной динамики (КМД), который не использует никаких эмпирических данных, кроме заряда и массы атомных ядер, позволяет согласованно описать результаты различных типов динамических экспериментов, в том числе некоторые эксперименты по импульсному нагреву проводников 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) [1], но также учитывает движение ионов. В настоящее время в расчетах могут использоваться более 1000 атомов [2-4], что позволяет изучать неупорядоченные системы и даже фазовые переходы [2, 4]. Это делает КМД перспективным методом для описания высокотемпературных свойств циркония в широком диапазоне параметров.

В данной работе представлены результаты КМД расчетов термодинамических свойств циркония в окрестности границы двухфазной области жидкость-газ. Рассчитана подробная сетка изотерм и изохор твердого и жидкого циркония в широком диапазоне плотностей и температур. Из КМД-моделирования восстановлена изобара нулевого давления, проведено сравнение с экспериментальными данными. Для выполнения первопринципного моделирования использовался программный код VASP [5].

Полученные данные помогут существенно улучшить существующие уравнения состояния циркония, устранив в том числе скандальную неопределенность в теоретических оценках его высокотемпературных свойств.

Работа выполнена в Объединенном институте высоких температур при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 20-79-10398).

Литература

1. *Martin R.M.* Electronic structure: basic theory and practical methods. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
2. *Hernández E.R., Rodríguez-Prieto A., Bergara A., Alfè D.* First-Principles Simulations of Lithium Melting: Stability of the bcc Phase Close to Melting // *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 104. P. 185701.
3. *Pozzo M., Desjarlais M.P., Alfè D.* Electrical and thermal conductivity of liquid sodium from first-principles calculations // *Phys. Rev. B.* 2011. Vol. 84. P. 054203.
4. *Pozzo M., Alfè D.* Melting curve of face-centered-cubic nickel from first-principles calculations // *Phys. Rev. B.* 2013. Vol. 88. P. 024111.
5. *Kresse G., Hafner J.* Ab initio molecular dynamics for liquid metals // *Phys. Rev. B.* 1993. V. 47. P. 558.

УДК 533.9.01

Плазменно-пылевые структуры в тлеющем разряде при криогенных температурах

Н.В. Гориунов^{1,2}, Р.Е. Болтнев^{2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

³Филиал ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова

Выполнено экспериментальное исследование плазменно-пылевых структур, образованных полидисперсными частицами CeO_2 в тлеющем разряде в диапазоне температур от 1.69 до 9.8 К. Впервые получена информация о размерах частиц, образующих плазменно-пылевую структуру, которая формируется при температурах ниже 2 К в тёмной моде тлеющего разряда [1]: было установлено, что распределение частиц по размерам частиц, вбрасываемых в область разряда, сокращается десятки раз, с $0.1 \div 100$ мкм до $0.5 \div 6$ мкм (рис. 1). С учётом полученной информации о среднем размере частиц, 2.3 мкм, были уточнены основные параметры ультрахолодной пылевой плазмы [2].

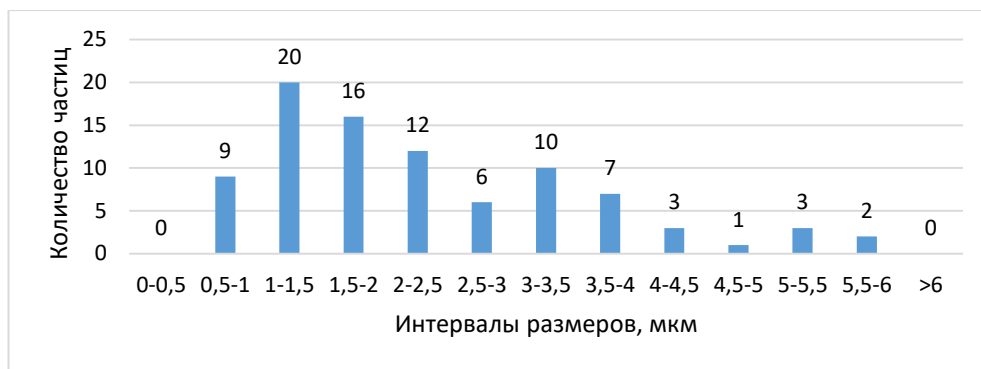


Рис.1. График распределения частиц по размерам после эксперимента

Работа выполнена в МФТИ при поддержке РНФ (проект №19-12-00354).

Литература

1. Асиновский Э.И., Кириллин А.В., Марковец В.В. Тлеющий разряд в гелии при криогенных температурах // ТВТ 1975. Т. 13. С. 933.
2. Boltnev R.E., Vasiliev M.M., Kononov E.A. and Petrov O.F., Formation of solid helical filaments at temperatures of superfluid helium as self-organization phenomena in ultracold dusty plasma // 2019 Sci. Rep. 9, 3261.

УДК 533.9

Пыле-акустические волны в слабосвязанной криогенной пылевой плазмы

А.А. Алексеевская^{1,2}, Р.Е. Болтнев², Ф.М. Трухачев^{1,2}, М.М. Васильев^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Объединенный институт высоких температур РАН

В данной работе использована новая экспериментальная установка для исследования криогенной плазмы и явлений, связанных с наличием в такой плазме заряженных макроскопических частиц. Криогенной плазмой называется плазма, температура нейтральной и ионной компонент в которой ниже 200 К и определяется температурой стенки газоразрядной трубки, охлаждаемой холодным газом либо криогенной жидкостью. Пылевая плазма представляет собой ионизованный газ, содержащий заряженные частицы конденсированного вещества микронных либо субмикронных размеров [1]. Свойства пылевой плазмы существенно разнообразнее обычной газовой плазмы. Наличие пылевой компоненты особенно сильно сказывается на коллективных процессах в плазме, что позволяет наблюдать и исследовать фазовые переходы в одно-, двух- и трехмерных системах, пылевые колебания, солитоны и ударные волны.

Экспериментально исследованы волны в криогенной пылевой плазме, образованной полидисперсными макрочастицами из диоксида церия в тлеющем разряде постоянного тока в газообразном гелии в температурном диапазоне 80-85 К. Для подсветки пылевого облака, сформированного в одной из страт, использовался лазерный нож. Результаты регистрировались скоростной видеокамерой. Полученные видеоданные обрабатывались при помощи специализированного программного кода, в результате чего были получены различные характеристики пылевых частиц: их координаты, скорости и траектории движения, параметр неидеальности и парные корреляционные функции.

Пылевые акустические волны с частотой 29 Гц и со скоростью 4 см/с наблюдались при температуре 83 К. Анализ парных корреляционных функций показал, что пылевая фракция является слабосвязанной. В частности, параметр неидеальности близок к единице ($\Gamma \sim 1$). По некоторым оценкам даже меньше её ($\Gamma < 1$). Другими словами, пылевая плазма находилась в агрегатном состоянии «жидкость», возможно даже была близка к состоянию «газ». Стоит отметить, что разрядно-пылевая плазма, как правило, является сильно неидеальной ($\Gamma \gg 1$). В работах [2-4] описан волновой нагрев пылевой плазмы пыле-акустическими волнами и солитонами. Во всех указанных экспериментах, волны возбуждались в верхней части облака, где пылевая фракция находилась в сильносвязанном состоянии. По мере роста амплитуды волн возрастала интенсивность взаимодействия волна-частица. При этом плазма переходила в слабосвязанное состояние. В отличие от указанных работ, в

описываемом случае пылевая фракция изначально находилась в слабосвязанном состоянии. Это обстоятельство свидетельствует об уникальных свойствах криогенной плазмы. Волны в такой плазме наблюдались впервые.

Литература

1. Фортков В.Е., Храпак А.Г., Молотков В.И., Петров О.Ф. // УФН, 2004, том 174, 706 с.
2. Teng L.-W., Chang M.-C., Tseng Y.-P., I L., Phys. Rev. Lett., 2009, vol. 103, p. 245005.
3. Trukhachev F.M., Vasiliev M.M., Petrov O.F., Vasilieva E.V. // Phys. Rev. E. 2019, vol. 100, p. 063202.
4. Chang M.-C., Teng L.-W., I L. // Phys. Rev. E., 2012, vol. 85, p. 046410.

УДК 539.194

Расчет термодинамических свойств двухатомных молекул с низкой энергией диссоциации в газовой фазе

М.А. Мальцев^{1,2}, И.В. Морозов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединенный институт высоких температур

Базы данных по термодинамическим свойствам веществ играют существенную роль в решении инженерных задач, связанных с проектированием ракетных двигателей, созданием новых материалов, развитием химических технологий, металлургии, горного дела, переработки отходов и др. Значительный вклад в решение этих задач внесла информационная система ИВТАНТЕРМО [1,2]. Согласно основным принципам, сформулированным для системы ИВТАНТЕРМО, информация в термодинамических базах данных должна регулярно обновляться. Для решения этой задачи необходима разработка новых методов расчета термодинамических функций и программ, реализующих их, в частности, использующих последние достижения в области квантовой химии.

Расчет термодинамических функций двухатомных молекул традиционно основан на использовании молекулярных постоянных. Однако этот метод можно усовершенствовать, используя потенциал межатомного взаимодействия, полученный квантово-химическими методами [3-6]. Для реализации этого метода необходимо создать программу, которая позволила бы эксперту для различных состояний молекулы анализировать влияние выбранной модели взаимодействия на результат расчета. К программе должны быть применены следующие требования: 1) современный пользовательский интерфейс; 2) расчет термодинамических функций с помощью молекулярных постоянных; 3) расчет по потенциалу межатомного взаимодействия; 4) кроссплатформенность. Исходя из этих требований был разработан макет веб-приложения (рис. 1), которое позволяет рассчитывать термодинамические функции двухатомного идеального газа. На основе данной схемы был разработан модуль по аппроксимации потенциальных кривых межатомного взаимодействия, апробированный на расчете термодинамических свойств соединений аргона.

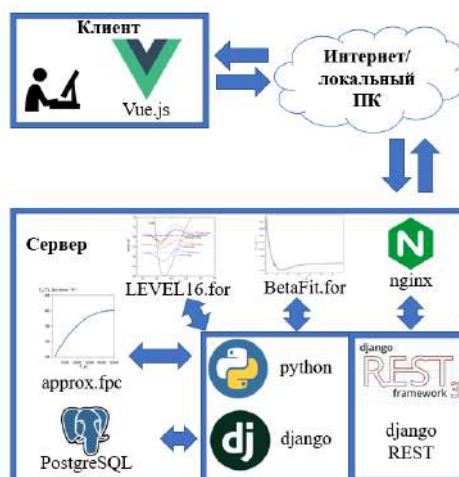


Рис. 1 Схема веб-приложения

Литература

1. Гурвич Л.В. ИВТАНТЕРМО – автоматизированная система данных о термодинамических свойствах веществ // Вестник АН СССР. 1983. №3. С. 54.
2. Belov G, Dyachkov S, Levashov P, Lomonosov I, Minakov D, Morozov I, Sineva M and Smirnov V The IVTAN-THERMO-Online database for thermodynamic properties of individual substances with web interface // J. Phys. Conf. Ser. 2018. V. 946. P. 012120
3. Мальцев М.А., Осина Е. Л. Расчет термодинамических функций идеальных двухатомных газов // Вестник ОИВТ РАН. 2019. Т.2. с. 41
4. Мальцев М.А., Осина Е.Л., Морозов И.В. Термодинамические свойства димеров аргона Ar_2^+ и Ar_2 // Теплофизика высоких температур. 2019. Т. 57 С. 42
5. Мальцев М.А., Осина Е.Л., Морозов И.В. Термодинамические свойства ArH^+ и ArH // Теплофизика высоких температур. 2019. Т. 58. С. 367

УДК 533.924

Структуры и динамика янус-частиц в коллоидной плазме при внешнем воздействии

Е.А. Кононов^{1,2}, М.М. Васильев^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}

¹ Объединённый институт высоких температур РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Изучение коллективных явлений в системах активных частиц стало одним из самых интересных и быстро развивающихся направлений в физике «мягкого» конденсированного вещества, а также в области статистической механики и материаловедения. Активными частицами могут являться янус-частицы, которые могут как частично состоять из отличных по свойствам материалов, различно взаимодействующих с внешней средой, так и иметь анизотропию по форме и вариативно реагировать на внешние возмущения. Настоящая работа направлена на изучение характера движения янус-частиц в коллоидной плазме при внешнем воздействии.

Эксперименты проводились в плазме емкостного высокочастотного разряда. янус-частицы инжестировались в плазму и образовывали структуру. В качестве янус-частиц использовались меламин-формальдегидные частицы, частично покрытые металлом. Воздействие на плазменно-пылевую систему осуществлялось с помощью лазерного излучения различной мощности. На основе полученных данных были проведены измерения среднеквадратичного смещения, линейного смещения вдоль и поперек вектора скорости движущихся частиц, а также построены траектории движения янус-частиц.

Полученные данные позволяют описать кинетические свойства янус-частиц в коллоидной плазме. Экспериментально установлено, что янус-частицы являются активными броуновскими частицами [1] и их активность возрастает с увеличением мощности действующего лазерного излучения. Установлено, что динамика движения модифицированных частиц изменяется при разных мощностях лазерного излучения и соответствует двум режимам: броуновскому движению и комбинированному самодвижению, состоящему, в свою очередь, из лазерно-индуцированного (фотофорез) и броуновского движения.

Сделан вывод, что изменение характера движения янус-частиц в коллоидной плазме при увеличении мощности лазерного излучения оказалось возможно благодаря анизотропии свойств материалов и поверхности Янус-частиц, в результате которой энергия лазерного излучения эффективно преобразовывалась в энергию направленного движения.

Работа выполнена за счёт средств гранта Российского научного фонда (проект № 20-12-00372).

Литература

1. Bechinger C., Di Leonardo R., Löwen H., Reichhardt C. and Volpe G. Active Particles in Complex and Crowded Environments // 2016 Rev. Mod. Phys. 88 045006

Теплофизика микрочастиц в жидком гелии

Ю.М. Цой¹, Р.Е. Болтнев²

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Объединённый институт высоких температур РАН

Главной целью настоящей работы является исследование процесса разогрева лазерным излучением сверхпроводящих частиц микронного размера в жидком гелии до температуры более 93.5 К и анализ экспериментальных условий, способствующих реализации разогрева частиц. Поскольку перегрев частиц при используемой в экспериментах плотности мощности лазерного излучения 2 Вт/см² наблюдался исключительно в области перехода гелия в нормальное состояние при $T = 2.178$ К были рассмотрены оба варианта - разогрева частиц в сверхтекучем и нормальном гелии. В первом случае аномально высокая теплопроводность гелия подавляется формированием у нагретой поверхности плотного слоя с высокой плотностью квантовых вихрей, образованных интенсивным противотоком нормальной и сверхтекучей компонент, что приводит к испарению гелия вокруг частицы и образованию газовой оболочки [1]. Во втором случае при достижении критической плотности теплопередачи быстро происходит переход к пузырьковому и плёночному кипению [2]. Поскольку в обоих случаях времена перехода к плёночному режиму не превышают 1 мс [2,3] был рассмотрен режим разогрева частицы, окружённой плёнкой газообразного гелия фиксированной толщины. Показано, что тепловое сопротивление Капицы приводит только к задержке формирования газообразной плёнки вокруг разогретой частицы.

Для микрочастиц диаметром 40 мкм сделаны оценки значений тепловыделений, необходимых для формирования гладкой стационарной плёнки вокруг сферического нагревателя [4] в зависимости от глубины погружения в жидкий гелий и показано, что с учётом неоднородности интенсивности лазерного излучения в поперечном сечении пучка, эти величины действительно могли быть достигнуты в экспериментах.

Работа выполнена в ОИВТ РАН при поддержке РНФ (проект №20-12-00372)

Литература

1. *Arp V.* Heat transport through helium II // *Cryogenics* 1970. V. 10. P. 96.
2. *Григорьев В. А., Павлов Ю. М., Аметистов Е. В.* Кипение криогенных жидкостей / Под ред. Д.А. Лабунцова. — М.: Энергия, 1977. — 289 с.
3. *Efimov V. B., Orlova A. A., Kondaurova L. P., Gorkun A.G.* Heat Transfer under Pulsed Heating in Superfluid Helium // *Low Temp. Phys.* 45(9) 988-993 (2019).
4. *Крюков А.П., Медников А.Ф.* Экспериментальное исследование кипения HeII на шаре // *ПМТФ.* 2006. Т. 47(6) С. 78.

533.951.2

Ускорение электронов в поле плазменной кильватерной волны, генерируемой фемтосекундным лазерным импульсом высокой интенсивности

И.Р. Умаров^{1,2}

¹ Объединённый институт высоких температур РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В работе рассмотрено взаимодействие высокоинтенсивного фемтосекундного лазерного импульса с разряженной плазмой, процесс генерации кильватерной волны и процесс ускорения тестового пучка электронов. Основной задачей было исследование параметров ускоряемых электронов, таких как средняя энергия, разброс по энергии, радиус пучка, длина и т.д.

Была проведена серия моделирований с помощью кода WAKE-EXI. Изначальный код двумерного квазистатического моделирования WAKE [Ошибка! Источник ссылки не найден.], используемый для моделирования распространения лазерного импульса в разреженной плазме, был модифицирован для описания процесса ускорения внешне инжектированных высокоэнергетических частиц.

Для примера приведены результаты расчёта прохождения импульсом, имеющим гауссовский профиль по радиусу и длительности с радиусом равным 68.2 мкм в фокальной плоскости и длительностью 50фс и приведённой амплитудой $a = 0.942$ ($a = eE/m\omega_0 c$, e – модуль заряда электрона, E – амплитуда напряжённости поля, m – масса электрона, ω_0 – плазменная частота, c – скорость света), водородной плазмы с заранее образованным каналом концентрации, имеющим квадратичную зависимость от радиуса $N = N_0 \left(1 + \left(\frac{r}{R_0}\right)^2\right)$, где r – расстояние от оси по радиусу, $R_0 = 180$ мкм – радиус канала с концентрацией на оси распространения лазерного импульса равной $N_0 = 1.75 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. После инжектировался моноэнергетичный пучок электронов с энергией 0.9 МэВ со среднеквадратическим отклонением по оси распространения равным $\sigma_{z,inj} = 2,3$ мкм среднеквадратическим отклонением по радиусу $\sigma_{\rho,inj} = 1,88$ мкм. Пучок инжектировался с задержкой относительно лазерного импульса $\Delta\xi = 10$, где расстояние ξ выражается в $k_{p0}^{-1} = c/(4\pi e^2 N_0/m)^{1/2}$, что является величиной, обратной модулю плазменного волнового вектора на оси. (Рис.1). После данный пучок электронов ускорялся в поле кильваторной волны на расстоянии 20 см. (Рис.2) Видно, что минимум разброса по энергии достигается после 14 см ускорения, а за 20 см ускорения средняя энергия пучка достигает значения 1.7 ГэВ.

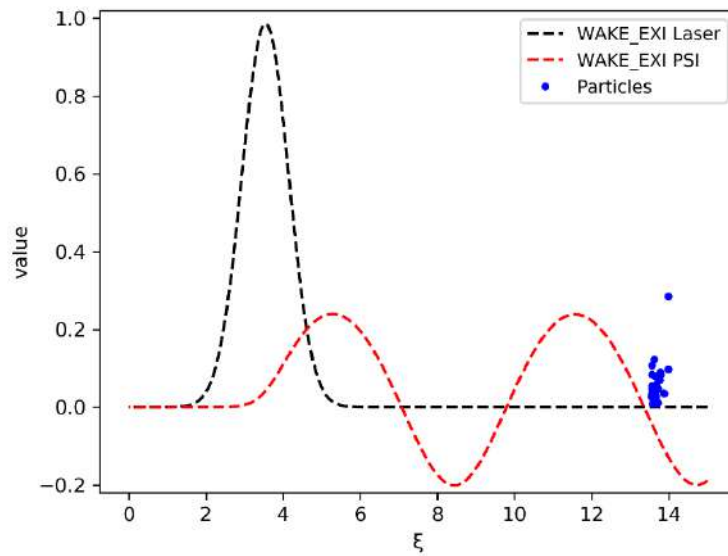


Рис.1 Нормированная огибающая лазерного импульса (пунктирная чёрная линия) и потенциал кильваторного поля (пунктирная красная линия) на оси на расстоянии распространения лазерного импульса $z = 0,51$ см (где сгусток захвачен). Синие точки указывают частицы сгустка на плоскости (ξ, ρ) .

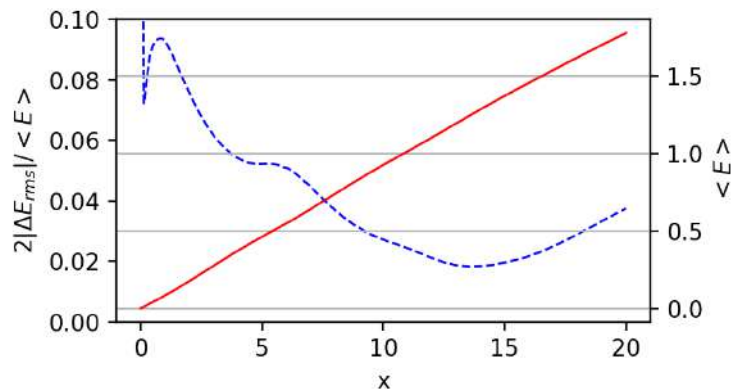


Рис.2 Усредненная энергия в ГэВ (сплошная линия) и нормированный среднеквадратичный разброс энергии (штриховая линия) ускоренного электронного сгустка в зависимости от длины ускорения в сантиметрах.

Литература

1. Patrick Mora and Thomas M. Antonsen, Jr. Kinetic modeling of intense, short laser pulses propagating in tenuous plasmas. *Physics of Plasmas*, 4(1):217–229, 1997.

Характер влияния мощности лазерного излучения на броуновское движение в коллоидных системах

А.С. Светлов^{1,2}, Е.А. Кононов^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}, М.М. Васильев^{1,2}

¹Объединённый институт высоких температур РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Представлены результаты экспериментального исследования характера движения полидисперсной эмульсионной системы при воздействии лазерного излучения различной мощности. Капли эмульсии находились в водном растворе стабилизатора и содержали субмикронные частицы углерода.

Для изучения характера движения в полученных эмульсионных системах, капли подвергались воздействию лазерного излучения различной мощности, их движение наблюдалось с помощью стереомикроскопа и регистрировалось видеокамерой.

В результате обработки экспериментальных видеоданных для капель эмульсии были получены координаты и скорости для каждого момента времени, определены кинетические энергии при различных значениях мощности лазерного излучения, а также построены графики среднеквадратичное смещения от времени.

Экспериментально наблюдалось движение полидисперсных капель эмульсий, содержащих частицы углерода. Углеродные частицы могут эффективно поглощать лазерное излучение, в результате чего возникающая термофоретическая сила может приводить в движение эти частицы внутри эмульсионной системы, что в свою очередь приводит к движению самих капель эмульсии.

В результате анализа графиков среднеквадратичного смещения капель эмульсии и зависимости кинетической энергии от плотности мощности лазерного излучения сделан вывод, что изменение мощности воздействующего лазерного пучка приводит к изменению характера движения эмульсионной системы.

Литература

1. *Clemens Bechinger, Roberto Di Leonardo*. Active particles in complex and crowded environments // *Rev. Mod. Phys.*, 2016, 88, 045006 DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.88.045006>

Экспериментальное исследование излучательных свойств тугоплавких материалов методом рефлектометрии

В.Н. Сенченко, Р.С. Беликов, С.А. Мельников

Объединённый институт высоких температур РАН

Тугоплавкие карбиды имеют аномально высокую температуру плавления (около 4000 К) и сохраняют высокую прочность и долговечность при экстремальных тепловых нагрузках. Сегодня в литературе недостаточно данных о терморadiационных свойствах карбидов при чрезвычайно высоких температурах.

Для исследования терморadiационных свойств тугоплавких карбидов может быть использован метод миллисекундного импульсного электронагрева. Суть метода заключается в быстром нагреве образца до высокой температуры вплоть до точки плавления за счет однородного объемного выделения тепла при прохождении по нему импульса электрического тока большой амплитуды [1]. Нагрев осуществляется в изобарических условиях в камере высокого давления при статическом давлении буферного инертного газа (Ar).

Для точного и надежного измерения температуры в эксперименте необходимо учитывать излучательную способность образца, которая зависит как от материала, так и от индивидуальных свойств поверхности исследуемого образца. Для имеющейся экспериментальной установки была разработана методика лазерной рефлектометрии. Лазерная рефлектометрия позволяет производить измерения спектральной излучательной способности тугоплавких карбидов при высоких температурах как в твердой, так и в жидкой фазах.

Основные принципы лазерной рефлектометрии включают измерение изменения спектральной излучательной способности материала при нагреве и сравнение излучательной способности при высоких температурах с измеренной при начальных условиях. Измерения спектральной излучательной способности при комнатной температуре проводятся в стационарном состоянии при помощи интегрирующей сферы. Измерения изменения излучательной способности в течение эксперимента на двух длинах волн проводятся спектрометром. Схема устройства для импульсного измерения излучательной способности изображена на рис.1.

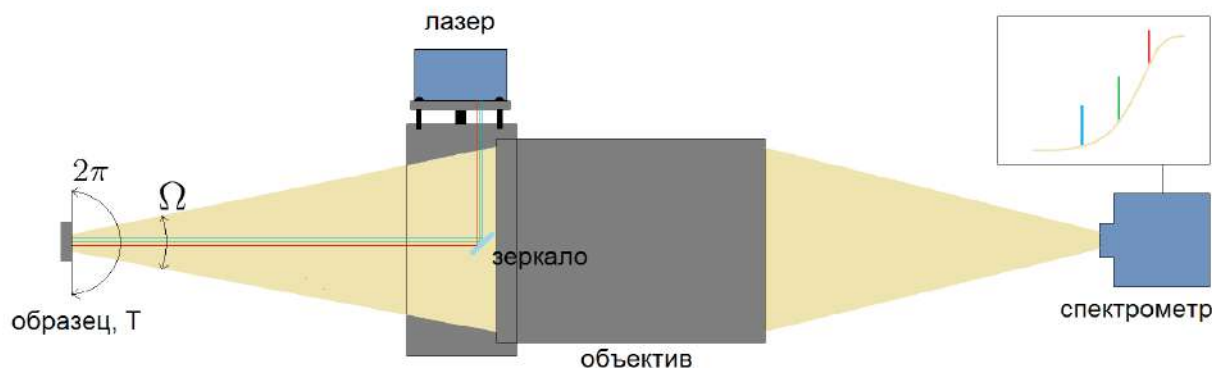


Рис.1 Принципиальная схема рефлектометрических измерений.

Для тестирования методики рефлектометрии проведены измерения излучательной способности вольфрама на длинах волн 532 и 445 нм в интервале температур 1600-2000 К. Полученные результаты в пределах погрешностей согласуются с литературными данными из [2], что подтвердило работоспособность методики.

Данная работа выполнена при поддержке гранта Российского Фонда Фундаментальных Исследований № 18-08-00923

Литература

1. R.S. Belikov, V.N. Senchenko and S.N. Sulyanov, Experimental investigation of thermophysical properties of eutectic Re–C at high temperatures // Journal of Physics: Conference Series, 2018, Vol. 946. P. 012106.
2. А.Е. Шейндин, Излучательные свойства твердых материалов, Справочник под ред. А.Е. Шейндина 1974, М.: «Энергия», 472 с.

Секция физики твердого тела

Председатель: А.А. Левченко (д.ф.-м.н.)

Зам. председателя: В.В. Кведер (д.ф.-м.н.)

Секретарь: А.Ф. Шевчук

Дата: 26.11.2020 Время: 10:00

УДК 537.622

Анализ микроструктуры и процессов перемангничивания спеченных композиций на основе порошков сплавов $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$, $\text{Sm}(\text{Co}_{0.6}\text{Cu}_{0.4})_6$ и $\text{Sm}(\text{Co}_{0.5}\text{Cu}_{0.5})_5$

Н.А. Косолапов, О.Б. Дегтева, Ю.Г. Пастушенков

Тверской государственный университет

Формирование спеченных гетерогенных композиций, позволяет создавать магнитные материалы с заданными физическими свойствами [1]. В настоящее время наиболее распространены выпускаемые промышленностью в больших объемах две группы высокоэффективных постоянных магнитов типа $R\text{-Zr-Co-Cu-Fe}$ и Nd-Fe-B . Однако, потенциальные возможности улучшения магнитных характеристик этих материалов в основном исчерпаны. Во всем мире ведется поиск принципиально новых магнитотвердых материалов, а также разработка оригинальных методов получения постоянных магнитов на основе известных сплавов и соединений [2].

С целью выяснения возможности реализации высококоэрцитивного состояния получены спеченные композиционные материалы на основе порошков сплавов $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ и $\text{Sm}(\text{Co}_{0.6}\text{Cu}_{0.4})_6$, содержащие от 40 до 70 вес.% первого компонента, а также сплава $\text{Sm}(\text{Co}_{0.5}\text{Cu}_{0.5})_5$ с содержанием того же первого компонента в 50 и 60 вес. %. В сплавах такого типа в высококоэрцитивном состоянии реализуется смешанный механизм перемангничивания: кроме задержки смещения доменных границ одновременно происходят процессы необратимого вращения вектора спонтанной намагниченности [3]. Образцы представляли собой брикеты, текстурованные в магнитном поле и спеченные при индивидуально подобранных для каждого состава температурах. Для наблюдения их микроструктуры и доменной структуры приготавливали металлографические шлифы по стандартной методике. Образцы для магнитных измерений вырезали из брикетов и придавали им сферическую форму.

Исследование микроструктуры образцов и количественный микроанализ их фазового состава проведены на растровом электронном микроскопе JEOL JSM-6610LV.

На рис. 1 приведены РЭМ-изображения, полученные на базисной плоскости спеченных композиций указанного состава. На поверхности выявляются три основные фазы – темная (спектры 3 и 4), серая (спектры 1 и 2) и светлая (спектры 5 и 6). Основную часть объема образца занимает серая фаза. Результаты рентгеноспектрального анализа этих фаз для состава $0.5\text{Sm}_2\text{Co}_{17}+0.5\text{Sm}(\text{Co}_{0.5}\text{Cu}_{0.5})_{5.0}$ приведены в таблице 1.

Относительное содержание элементов, ат. %					
Номер спектра	C	O	Co	Cu	Sm
1	0	0	76.54	11.78	11.68
2	0	00	77.32	11.32	11.36
5	0	8.78	55.47	21.54	14.20
6	0	6.76	70.56	9.84	12.84

Таб. 1.

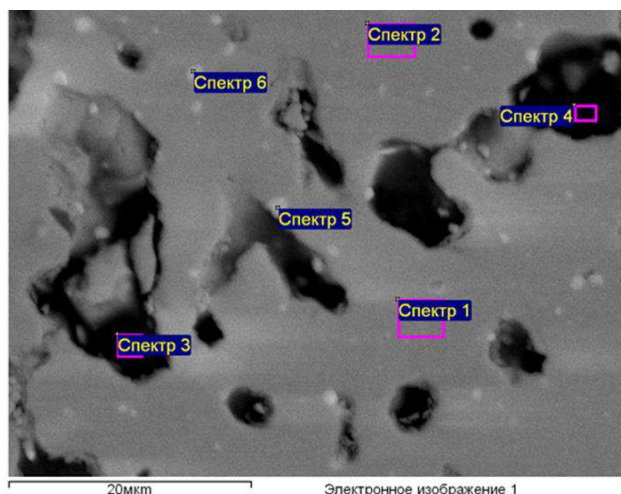


Рис. 1. РЭМ-изображение базисной поверхности образца $0,5\text{Sm}_2\text{Co}_{17}+0,5\text{Sm}(\text{Co}_{0,5}\text{Cu}_{0,5})_{5,0}$ в режиме ВЕС с указанием областей, с которых регистрировались спектры.

Наблюдение доменной структуры осуществлялось методом магнитной силовой микроскопии с помощью сканирующего зондового микроскопа SolverNext.

Методом вибрационного магнитометра измерены кривые намагничивания вдоль легкой и трудной оси намагничивания и кривые размагничивания образцов спеченных композиций второго типа $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}/\text{Sm}(\text{Co}_{0,5}\text{Cu}_{0,5})_5$ с различным содержанием основных компонентов (рис. 2) в статических магнитных полях до 30 кЭ. Определены значения удельной намагнитченности насыщения σ_s и коэрцитивной силы H_{cl} для всех исследованных образцов. Установлено, что сразу после спекания порошковых брикетов без дополнительных термообработок значения коэрцитивной силы образцов изменяются в пределах 3 – 9 кЭ. Анализ микроструктуры и рентгеновских спектров образцов указывает на наличие трех типов фазовых составляющих $\text{Sm}_2(\text{Co,Cu})_{16}$, $\text{Sm}_2(\text{Co,Cu})_{17}$, различающихся концентрацией кобальта и меди в зависимости от состава композиции, а также окислов самария. Сравнение результатов для композиций разного состава показывают, что при спекании происходит диффузия атомов Cu и их перераспределение между основными фазовыми составляющими $\text{Sm}_2(\text{Co,Cu})_{16}$ и $\text{Sm}_2(\text{Co,Cu})_{17}$. Высказано предположение, что высококоэрцитивное состояние исследуемых спеченных композитов, обусловлено в основном особенностями тонкой структуры, формирующейся между зернами в процессе их спекания.

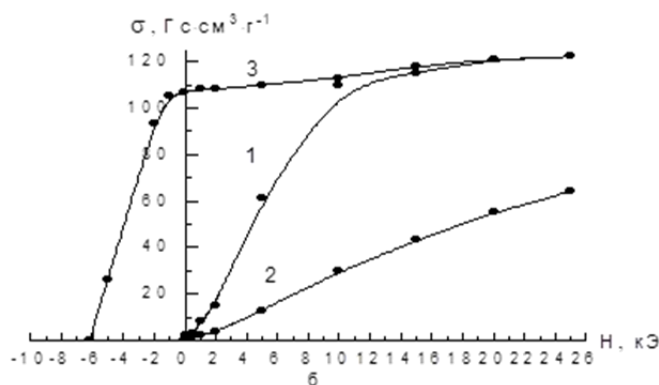


Рис. 2. Кривые намагничивания вдоль легкой (1), трудного (2) направлений и кривые размагничивания из состояния магнитного насыщения (3) образцов спеченных композиций $0,5\text{Sm}_2\text{Co}_{17} + 0,5\text{Sm}(\text{Co}_{0,5}\text{Cu}_{0,5})_5$

Установлено, что характер угловых зависимостей коэрцитивной силы $H_{cl}(\varphi)$ и намагнитченности $\sigma_H(\varphi)$ образцов указывает на смешанный механизм магнитного гистерезиса: задержку смещения доменных границ на границах микрообластей, различающихся концентрацией меди, и вращения вектора намагнитченности.

Изображения магнитных полей рассеяния доменной структуры исследуемых образцов подтверждают наличие гетерогенных областей с различающимися магнитными параметрами.

Литература

1. Супонев Н.П., Дегтева О.Б., Семенова Е.М. Физика магнитных материалов. – Тверь, 1997. С.38-48.
2. Zhang X.Y. Heterostructures: new opportunities for functional materials. – Mater. Res. Lett., 2020. P.49-59.
3. Lyakhova M.B., Semenova E.M., Ivanov R.P. High-temperature behavior of hard magnetic alloys (R,Zr)(Co,Cu,Fe)_z (R = Sm, Gd). – Tver: Metal Science and Heat Treatment, 2015. P.602-608.

УДК 544.313

Анализ термодинамического равновесия кубического и тетрагонального бейнита в сплавах железо-углерод в случае запрета на образование карбидов

И.В. Булдашев¹, Д.А. Мирзаев¹

¹Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)

Интерес исследователей к новому классу сталей, называемыми «объемно-наноструктурированными», в основе которых лежит структура бескарбидного бейнита, связан с потребностью промышленности в появлении новых сталей с удачным сочетанием высокой пластичности и высокой прочности. Высокое содержание углерода в таких сталях объясняется возникновением тетрагональной кристаллической решетки в бескарбидном бейните. В работе [1], основываясь на теории Зинера-Хачатуряна [2], были рассчитаны химические потенциалы железа и углерода в твердых растворах Fe-C с тетрагональной и кубической решетками. На основе этого анализа получены уравнения равновесия кубического и тетрагонального бейнитного феррита или мартенситных фаз:

$$RT \left(\ln \left(\frac{x_C^T}{3-4x_C^T} \right) - \ln \left(\frac{x_C^\alpha}{3-4x_C^\alpha} \right) \right) - \frac{2}{3} \frac{x_C^T}{1-x_C^T} \left(N_0 \lambda_0 \eta^2 + \frac{1}{3} {}^0L_{Fe:Va,C}^{bcc} \right) + \frac{2}{9} \left(\frac{x_C^\alpha}{1-x_C^\alpha} \right) {}^0L_{Fe:Va,C}^{bcc} + \frac{RT}{3} [2(1-\eta) \ln(1-\eta) + (1+2\eta) \ln(1+2\eta)] = 0 \quad (1)$$

$$3RT \left(\ln \left(\frac{3-4x_C^T}{3(1-x_C^T)} \right) - \ln \left(\frac{3-4x_C^\alpha}{3(1-x_C^\alpha)} \right) \right) + \frac{1}{3} \left(\frac{x_C^T}{1-x_C^T} \right)^2 \left(N_0 \lambda_0 \eta^2 + \frac{1}{3} {}^0L_{Fe:Va,C}^{bcc} \right) - \frac{1}{9} \left(\frac{x_C^\alpha}{1-x_C^\alpha} \right)^2 {}^0L_{Fe:Va,C}^{bcc} = 0 \quad (2)$$

где x_C^α и x_C^T – атомные доли углерода в кубической α - и T – тетрагональной фазах. N_0 – количество атомов железа, λ_0 – параметр деформационного взаимодействия, а η – параметр порядка в теории Хачатуряна. Величина ${}^0L_{Fe:Va,C}^{bcc}$ в модели Хиллерта-Стаффонсона эквивалентна энергии смешения атомов углерода и октаэдрических пор. Критика Агреном значения этой величины у Гу-стафсона и сделанные Маклелланом и Бхадешиа поправки привели в итоге нас к величине ${}^0L_{Fe:Va,C}^{bcc}$ равной 1300 кДж/моль, которая использовалась при совместном решении уравнений (1) и (2). Результаты расчета представлены на Рис.1 в виде диаграммы, из которой видно, что при 300 К кубический мартенсит, содержащий 0,24 масс.% С находится в равновесии с тетрагональным мартенситом с концентрацией 0,57 масс.% С. Приблизительно в этом интервале наблюдается нарушение линейности отношения c/a в зависимости от содержания углерода по Г.В. Курдюмову [3]

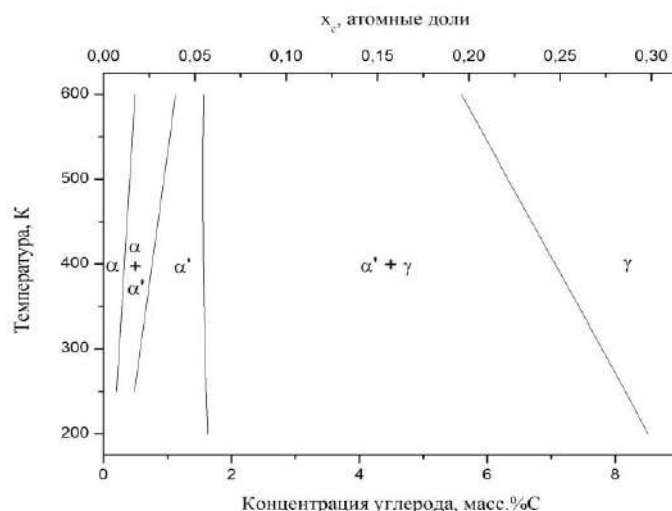


Рис. 1. Низкотемпературная метастабильная диаграмма фазового равновесия Fe-C (при условии подавления карбидных выделений).

Литература

1. Мирзаев Д.А., Мирзоев А.А., Булдашев И.В., Окишев К.Ю. Термодинамический анализ возникновения тетрагонального бейнита в сталях // ФММ. 2017. Т. 118, № 6, С. 547.
2. Хачатурян А.Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. — М.: Наука, 1974, 384 с.
3. Курдюмов Г.В. Явления закалки и отпуска. — М.: Металлургиздат, 1960, 64 с.

УДК 538.941

Взаимодействие тока инжектированных зарядов с движением жидкости

М.Р. Султанова^{1,2}, И.А. Ремизов^{1,2}

¹Институт физики твердого тела РАН

²Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН

В данной работе представлены одни из первых экспериментальных результатов по наблюдению за взаимодействием тока инжектированных зарядов с движением жидкости. Исследования проводились в оптическом гелиевом криостате на прямоугольной ячейке. В ходе эксперимента измерялся ток, приходящий на приемный коллектор, который состоял из 5 сегментов. Волны на поверхности возбуждались двумя перпендикулярными плунжерами. Волны формировали в жидкости решетку вихрей [1]. Инжектированные заряды являются оптимальными частицами для регистрации квантовых вихрей под поверхностью сверхтекучего гелия [2], т.к. гелий при температуре ниже T_λ является не классической жидкостью, а является квантовой. Основная цель работы заключалась в том, чтобы обнаружить формирование вихрей при накачке двумя неколлинеарными плунжерами на поверхности сверхтекучего гелия и как скажется включение накачки на распределении токов на приемном коллекторе.

В экспериментах измерялся ток, приходящий на принимающие коллекторы в отсутствие накачки, затем во время накачки поверхности сверхтекучего гелия с помощью двух перпендикулярных плунжеров. Во время эксперимента напряжение, подаваемое на источник $U_{\text{source}} = 400$ В, напряжение на боковых гранях $U_{\text{side1,2}} = 6$ В, напряжение на верхней обкладке $U_{\text{up}} = 5$ В, на нижней обкладке $U_{\text{down}} = 25$ В. До включения накачки ток на центральном коллекторе находился на уровне 88 фА. Токи, приходящие на коллекторы -1 и 1, составили 21,8 фА и 24 фА соответственно. После включения накачки с частотой 13 Гц и разности фаз электрических сигналов, подаваемых на плунжеры $\Delta\phi = 90$, был измерен ток на принимающих коллекторах. Находясь несколько минут в стационарном состоянии токи были перераспределены: на центральном сегменте ток снизился до 4,5 фА, в левом сегменте (1) ток увеличился до 96 фА, в правом сегменте -1 ток, слева на уровне 17 фА.

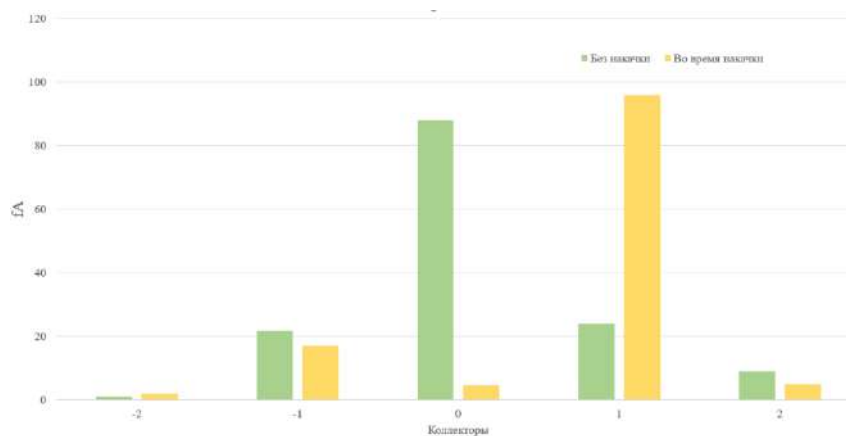


Рис.1. Ток на приемном коллекторе до накачки (зеленые гистограммы) и во время накачки (желтые гистограммы). $U_{\text{source}} = 400 \text{ В}$, $U_{\text{side1,2}} = 6 \text{ В}$, $U_{\text{up}} = 5 \text{ В}$, $U_{\text{down}} = 25 \text{ В}$, $f_{\text{re}} = 13 \text{ Гц}$, $\Delta\phi = 90^\circ$.

Проведя экспериментальные исследования на жидком гелии, было обнаружено, что накачка влияет на распределение токов на приемном коллекторе. Происходит перераспределение токов между сегментами, а так же суммарный ток понизился на 12%. Падение суммарного тока на принимающем коллекторе демонстрирует наличие стока зарядов в объеме жидкости – наличие квантовых вихрей. Работа требует продолжения исследований.

Работа выполнена при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования РФ #075-15-2019-1893

Литература

1. S V Filatov, V M Parfenyev, S S Vergeles, M Y Brazhnikov, A A Levchenko, V V Lebedev 2016 Phys. Rev. Lett. 116 (5) 054501.
2. P M Walmsley, A I Golov, H E Hall, A A Levchenko, and W F Vinen 2007 PRL 99 265302

УДК 621.315.592.3

Влияние включений ZnO и легирования In на термоэлектрические свойства скуттерудита $\text{Co}_4\text{Sb}_{12}$

Е.В. Чернышова¹, И.А. Сергиенко¹, А.П. Новицкий¹, А.И. Воронин¹, В.В. Ховайло^{1,2}

¹Национальный исследовательский технологический университет МИСиС

²Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)

Исследование термоэлектрических (ТЭ) материалов является одной из ключевых задач по решению проблемы повышения энергоэффективности термоэлектрических устройств. Основной задачей является оптимизация трех взаимозависимых свойств материалов: коэффициента Зеебека (S), электрической (σ) и тепловой (κ) проводимости, которые определяют добротность $zT = S^2\sigma T / \kappa$ ТЭ материала.

Заполненные скуттерудиты $M\text{Co}_4\text{Sb}_{12}$ (где – M гостевой атом) являются коммерчески лидирующими в диапазоне средних температур (400 – 600 °С) из-за их высокого значения zT более 2,0 [1]. Один из подходов, позволяющих достичь высокие значения zT , состоит в создании композиционного материала, состоящего из матрицы с большим коэффициентом мощности $PF = S^2\sigma$ и минимизации его теплопроводности за счет внедрения второй фазы [2].

В данной работе методом индукционной плавки были получены соединения номинального состава $\text{InCo}_4\text{Sb}_{12}$, затем производилось их смешивание с нанопорошком ZnO в шаровой мельнице в различных соотношениях, с целью получения композита состава $\text{InCo}_4\text{Sb}_{12} + x \text{ масс.}\% \text{ ZnO}$ ($x = 0; 0,01; 0,027; 0,074$). Консолидация осуществлялась методом искрового плазменного спекания. С помощью сканирующей электронной микроскопии было показано, что материалы представляют собой композит – гомогенные области $\text{InCo}_4\text{Sb}_{12}$ с небольшой частью окисленного индия до In_2O_3 и с включениями ZnO. Микрофотографии изображены на рис. 1.

Исследования температурных зависимостей транспортных свойств показали, что все полученные образцы являются электронными полупроводниками. Было установлено, что влияние добавки ZnO на электрофизические свойства фазы $\text{InCo}_4\text{Sb}_{12}$ является незначительным. Теплопроводность композиционного материала снижается с добавлением In относительно чистого CoSb_3 [3], что обусловлено дополнительным рассеянием фононов на атомах индия в $\text{Co}_4\text{Sb}_{12}$. На рис. 2 представлена термоэлектрическая добротность полученных образцов, максимальное значение zT достигнуто для образца номинального состава $\text{InCo}_4\text{Sb}_{12} + 2,7$ масс. % ZnO из чего можно сделать вывод, что внедрение ZnO в матрицу легированного индием CoSb_3 оказывает положительное воздействие на термоэлектрическую эффективность.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект № 19-79-10282).

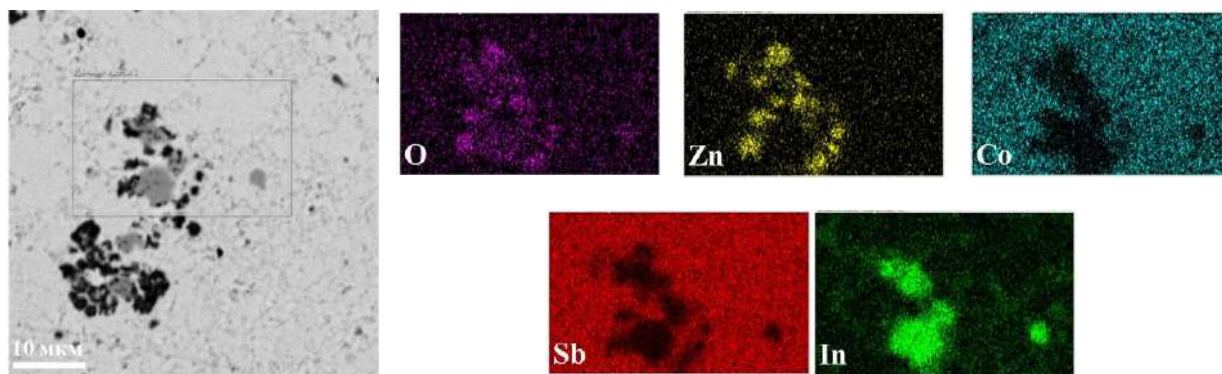


Рис. 1. Данные ЭДС-картирования для образца $\text{InCo}_4\text{Sb}_{12} + 1$ масс. % ZnO

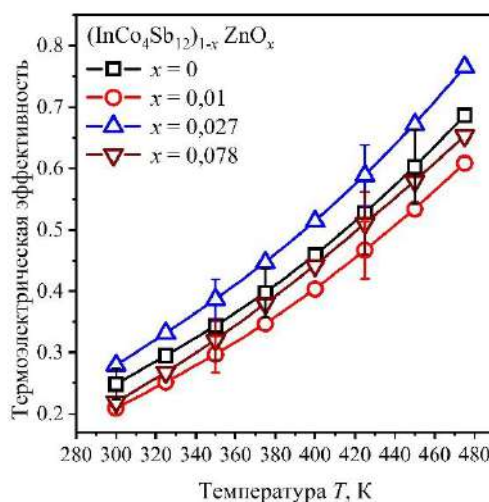


Рис. 2. Температурная зависимость термоэлектрической эффективности композита $\text{InCo}_4\text{Sb}_{12} + x$ масс.% ZnO ($x = 0; 0,01; 0,027; 0,074$)

Литература

1. Rogl G. et al. N-type skutterudites $(\text{R}, \text{Ba}, \text{Yb})_y\text{Co}_4\text{Sb}_{12}$ ($\text{R} = \text{Sr}, \text{La}, \text{Mm}, \text{DD}, \text{SrMm}, \text{SrDD}$) approaching $zT \approx 2.0$ // Acta Mater. 2014. V. 63. P. 30.
2. Rogl G., Rogl P. How nanoparticles can change the figure of merit, zT , and mechanical properties of skutterudites // Mater. Today Phys. 2017. V. 3. P. 48.
3. Chubilleau C. et al. Influence of ZnO nano-inclusions on the transport properties of the CoSb_3 skutterudite // J. Alloys Compd. 2013. V. 554. P. 340.

Влияние подложки на проявление классического и квантового эффектов в ультратонких пленках висмута

В.А. Гереза¹, В.М. Грабов¹

¹РГПУ им. А.И. Герцена

Работа посвящена исследованию структуры и гальваномагнитных свойств ультратонких пленок висмута толщинами 10–50 нм, полученных методом термического испарения в вакууме на подложках из слюды и стекла. Вследствие особенностей кристаллической и зонной структуры висмута, присущих полуметаллам, квантовые и классические размерные эффекты в структурах пониженной размерности на его основе являются хорошо наблюдаемыми [1, 2]. В предыдущих работах, посвященных исследованию размерных эффектов в образцах, полученных на подложках из слюды, обнаружены, как осцилляции гальваномагнитных коэффициентов от толщины пленки [3], так и переход температурной зависимости удельного сопротивления к виду типичному для металлов при уменьшении толщины образцов, который обуславливает значительный рост концентрации носителей заряда [4]. В работе [5] предполагается, что возникновение этого эффекта может быть связано с проявлением состояния топологического изолятора при уменьшении толщины пленки под действием плоскостной деформации растяжения, обусловленной различием коэффициентов температурного расширения (КТР) висмута и слюды. Выбор в качестве подложек слюды и стекла, как материалов с близкими КТР, позволяет считать деформации, обусловленные растяжением пленки при температуре ниже температуры получения, одинаковыми. То есть на гальваномагнитные свойства в первую очередь будет оказывать различие структуры образцов, обусловленное природой подложек.

Исследования проводились на образцах, полученных методом непрерывного термического испарения в высоком вакууме порядка 10^{-5} Торр. В качестве подложек использовались слюда марки СОВ толщиной 5–40 мкм и боросиликатное покровное стекло толщиной 150–200 мкм, предварительно очищенное химическим и термическим методами. Исследование структуры поверхности образцов проводилось методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). Измерение толщины проводилось с помощью метода избирательного химического травления, описанного в работе [6]. Измерение электрических и гальваномагнитных свойств проводилось по классической методике при постоянном токе и постоянном магнитном поле в диапазоне температур 77–300 К. На основе полученных данных проведен расчет концентрации и подвижности носителей заряда.

Методами АСМ и рентгеноструктурного анализа установлено, что кристаллографическая ориентация пленок на двух типах подложек одинакова. Размер кристаллитов пленок на слюде превосходит толщину пленки на два порядка, для образцов на стекле характерен размер порядка 0.05–0.1 мкм. То есть размеры кристаллитов пленок на слюде на порядок превосходят их размеры на стекле. Отношение размера кристаллитов к толщине образцов на подложке из слюды значительно увеличивается при уменьшении толщины, аналогичная тенденция характерна и для образцов на стекле, однако это отношение на порядок меньше.

Обнаруженные особенности электрических и гальваномагнитных свойств ультратонких пленок на слюде позволяют выделить два интервала толщин: 20–50 нм и 10–18 нм. Для первого интервала характерно увеличение сопротивления при понижении температуры вследствие классического размерного эффекта, немонотонная зависимость относительного магнетосопротивления от температуры и смещение максимума на зависимости коэффициента Холла в область более высоких температур. Концентрация носителей заряда в этом диапазоне толщин уменьшается при понижении температуры. На зависимостях гальваномагнитных свойств от толщины в этом диапазоне наблюдаются осцилляции с периодом примерно 10–12 нм. Концентрация носителей заряда сравнима с концентрацией в объемном кристалле.

Во втором интервале толщин температурная зависимость имеет вид, характерный для металлов, то есть убывает с понижением температуры. Относительное магнетосопротивление мало и слабо зависит от температуры. Подвижность носителей электрического заряда с уменьшением толщины пленки уменьшается, а их концентрация резко возрастает (рис. 1). Она на порядок превосходит концентрацию носителей заряда в объемном кристалле. Линейность зависимости обратной подвижности от обратной толщины свидетельствует о значительном вкладе классического размерного эффекта в данном диапазоне. Квантовые осцилляции на зависимостях гальваномагнитных свойств и концентрации не наблюдаются.

Концентрация носителей заряда ультратонких пленок на стекле слабо зависит от температуры и толщины, а особенности электрических и гальваномагнитных свойств говорят о том, что квантовый размерный эффект в них не наблюдается. Это связано с их мелкоблочной структурой, вследствие которой длина свободного пробега даже при самых малых толщинах оказывается порядка или меньше толщины пленки. Согласно принципу Иоффе-Регеля зонный энергетический спектр носителей заряда определяется ближним порядком в неупорядоченных, аморфных или сильно дефектных кристаллах. Для таких систем длина свободного пробега составляет примерно единицы межатомных расстояний. Поэтому наноразмерные объекты таких сред будут иметь энергетический спектр носителей заряда такой же, как и массивные объекты. Единственным отличием может быть только вклад классического размерного эффекта в электрические свойства пленок по сравнению с массивными объектами. А энергетический спектр носителей заряда и их концентрация должны быть такими, как и в массивном объекте. Что и наблюдается в ультратонких пленках на стекле.

В пленках на слюде длина свободного пробега существенно больше длины волны де Бройля и толщины пленки, поэтому возможно формирование дискретных уровней энергии, обусловленных квантовым размерным эффектом, что проявляется в виде осцилляций в зависимости коэффициентов переноса от толщины пленки. Другим проявлением квантовой когерентности может быть формирование специфического энергетического спектра квантовых состояний на поверхности, состояний типа топологического изолятора, что приводит к существенному увеличению концентрации носителей заряда при уменьшении толщины пленки. В образцах с более мелкоблочной структурой, полученных на стекле, такой эффект не наблюдается. Таким образом, можно сказать, что на проявление описанного эффекта в значительной мере влияет наличие квантового размерного эффекта в явлениях переноса носителей заряда.

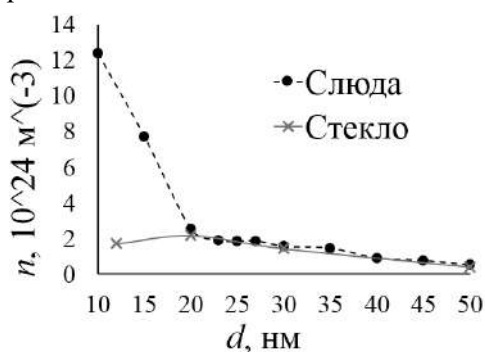


Рис. 1. Зависимость концентрации носителей заряда от толщины образца

Литература

1. Garcia N., Kao Y., Strongin M. Galvanomagnetic Studies of Bismuth Films in the Quantum-Size-Effect Region // Phys. Rev. B. 1972. V. 5. P. 2029.
2. Gitsu D.V., Huber T.E., Konopko L.A., Nikolaeva A.A. Size Effects in Quantum Single Crystal Bismuth Wires in Glass Cover // J. Nanoelectron. Optoelectron. 2009. V. 4. P. 40.
3. Демидов Е.В., Грабов В.М., Комаров В.А., Крушельницкий А.Н., Суслов А.В., Суслов М.В. Особенности проявления квантового размерного эффекта в явлениях переноса в тонких пленках висмута на подложках из слюды // Физика и техника полупроводников. 2019. Т. 53. № 6. С. 736.
4. Герега В.А., Грабов В.М., Комаров В.А., Крушельницкий А.Н., Каблукова Н.С. Гальваномагнитные явления в ультратонких пленках чистого висмута // Наука настоящего и будущего. 2019. Т. 3. С. 52.
5. Демидов Е.В., Грабов В.М., Комаров В.А., Каблукова Н.С., Крушельницкий А.Н. Состояние топологического изолятора в тонких пленках висмута под воздействие плоскостной деформации растяжения // Физика и техника полупроводников. 2018. Т. 60. № 3. С. 452.
6. Демидов Е.В., Комаров В.А., Крушельницкий А.Н., Суслов А.В. Измерение толщины блочных пленок висмута методом атомно-силовой микроскопии с применением избирательного химического травления // Физика и техника полупроводников. 2017. Т. 51. № 7. С. 877.

Выращивание двухъямных $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x < 0.1$) гетероструктур для исследования низкоразмерных электронно-дырочных систем

*И.П. Казаков¹, В.А. Цветков¹, М.А. Акмаев¹, А.В. Клековкин¹, В.П. Мартовицкий¹,
О.В. Уваров², С.А. Зиновьев¹*

¹ Физический институт им. П.Н. Лебедева

² Институт общей физики им. А.М. Прохорова

Интенсивные исследования многочастичных взаимодействий в низкоразмерных электронно-дырочных системах (ЭДС) высокой плотности привели к обнаружению новых необычных фаз конденсированного состояния — дипольной электронно-дырочной жидкости (ЭДЖ) [1] и бозе-эйнштейновского конденсата (БЭК) [2–4] дипольных экситонов. Показано, что эти фазы должны обладать многообещающими свойствами, такими как сверхпроводимость и сверхтекучесть (ЭДЖ, БЭК), крупномасштабная когерентность (БЭК). Исследования были выполнены, главным образом, на гетероструктурах $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$ I рода.

В данной работе исследуются гетероструктуры Si/SiGe , в которых электронно-дырочная система должна демонстрировать не менее интересное поведение [5–7]. В отличие от структур $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$, пространственно непрямая электронно-дырочная система может быть создана в структурах SiGe без приложения внешнего электрического поля. Время жизни неравновесных носителей заряда в Si , который является непрямозонным полупроводником, велико (более чем на три порядка больше, чем в GaAs), что позволяет достигать высоких концентраций носителей заряда и исследовать их взаимодействия, приводящие к образованию многочастичных состояний даже при малых уровнях возбуждения.

В настоящей работе на подложках из монокристаллов твердого раствора $\text{Si}_{0.935}\text{Ge}_{0.065}$ (001) методом молекулярно-пучковой эпитаксии на установке SIVA были выращены напряжённые гетероструктуры $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ с двойными КЯ, в которых КЯ для электронов находятся в растянутых слоях Si , разделённых сжатым слоем твердого раствора $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (барьер для электронов и КЯ для дырок). Концентрации Ge (x) в слое $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ были равны 0.13, 0.055, 0.035, 0.065 в образцах М1, М2, М3, М4, соответственно.

Данные рентгеновской дифрактометрии свидетельствовали о высоком качестве полученных структур. Отклонение от заданного состава $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ слоев составляло менее 5%, размытие гетерограниц незначительное. На спектрах низкотемпературной фотолюминесценции (ФЛ) представленных на рисунке 1а, отчетливо наблюдается излучение из выращенных структур. Видно, что с увеличением концентрации Ge в барьерном слое, интенсивность рекомбинационного излучения экситонов из структуры растет, а спектральное положение линий этого излучения смещается в область меньших энергий. Однако, стоит отметить, что в выращенных структурах спектральное положение линии дипольных экситонов КЯ - QW: E_x слабо зависит от содержания Ge в барьере $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. В двухъямной $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ структуре линия QW: E_x должна смещаться при изменении содержания Ge в разы сильнее [8]. Данная особенность может быть связана с флуктуациями потока паров Ge при низкой рабочей температуре молекулярного источника (МИ), что наблюдалось нами методом спектрометрии. Чтобы уменьшить флуктуации потока Ge , слой твёрдого раствора $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ КЯ выращивался в режиме модуляции (периодического перекрытия) молекулярного потока (МП) Ge при постоянном МП Si , что давало возможность увеличить ток электронной пушки МИ Ge . Были выращены одиночные $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ КЯ ($x < 0.1$) в режиме модуляции (периодического перекрытия) молекулярного потока (МП) Ge при постоянном МП Si на подложках Si (001) (см. Таблицу 1) и $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ КЯ без модуляции МП потока Ge на тех же подложках.

По данным ПЭМ, в слоях $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, отсутствовала какая-либо модуляция по составу в направлении роста. На спектрах ФЛ образцов выращенных в режиме модуляции наблюдались все линии, характерные для образцов с КЯ постоянного состава, хотя интенсивность линий от КЯ несколько меньше (~15%) (рис. 1б). Форма линий и ширина так же совпадает. Не совпадение положения линий, по-видимому, связано с небольшой разницей в концентрации Ge в КЯ.

К сожалению, полученные нами результаты не дают нам полного понимания причин слабого влияния содержания Ge в барьере $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ на спектральное положение линии ФЛ QW: E_x . Данная особенность является предметом для будущих исследований.

Авторы выражают благодарность фонду РФФИ за финансовую поддержку по грантам № 16-02-00986 а, № 16-29-03352 офи_м и Программе Президиума РАН.

№ структуры	Эффективная толщина слоя, Å		Количество периодов, N	Усреднённый состав слоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, x
	$d_{\text{SiGe}} (\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y)$	$d_{\text{Si}} (\text{Si})$		
A	14	1.4	3	0.08
B	3.14	1.4	10	0.06
C	2.1	2.1	11	0.09
D	1.4	1.4	17	0.01
E	2.8	1.4	11	0.08

Таб. 1. Предполагаемые параметры слоёв твёрдого раствора $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ в КЯ, выращенных в режиме модуляции МП Ge.

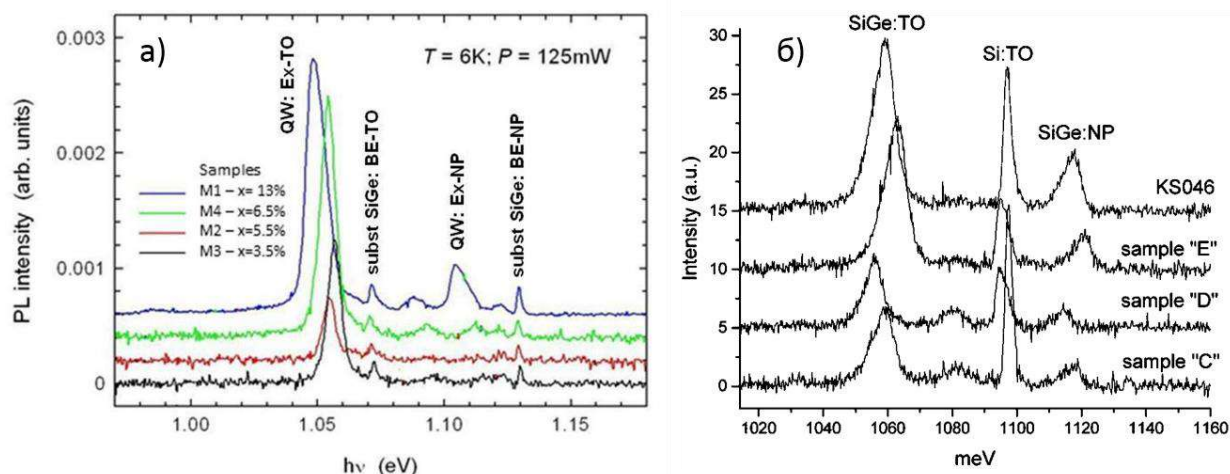


Рис. 1. Спектры ФЛ, измеренные при $T=6\text{K}$, структур: а) выращенных на подложке SiGe с двойными КЯ $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ и концентрацией Ge в барьерном слое $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 13%, 5.5%, 3.5%, 6.5%; б) выращенных на подложке Si с модуляцией МП Ge имеющие в слое КЯ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ усреднённые концентрации x, равные 0.09 (C), 0.01 (D), 0.08 (E), и без образца модуляции МП (KS046).

Литература

1. Gorbunov, A.V., Timofeev, V.B. Interwell excitons in a lateral potential well in an inhomogeneous electric field // JETP Lett. 2004. V. 80. P. 185.
2. Timofeev V. B. and Gorbunov A. V. Bose-Einstein condensation of dipolar excitons in double and single quantum wells // Phys. Stat. Sol.(c) 2008. V. 5. I. 7. P. 2379.
3. Gorbunov A. V. and Timofeev V. B. Compensation of dipolar-exciton spin splitting in magnetic field // Sol. St. Comm. 2013. V. 157. P. 6.
4. Timofeev V. B. Larionov A. V. Grassi-Alessi M. Capizzi M. and Hvam J. M. Phase diagram of a two-dimensional liquid in $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ biased double quantum wells // Phys. Rev. B 2000. V. 61. I. 12. 8420.
5. Burbaev T. M. Kozyrev D. S. Sibeldin N. N. and Skorikov M. L. Luminescence of a quasi-two-dimensional electron-hole liquid and excitonic molecules in $\text{Si}/\text{SiGe}/\text{Si}$ heterostructures upon two-electron transitions // JETP Lett. 2013. V. 98. I. 12. P. 926.
6. Orlov A. Levashova N. Burbaev T. The use of asymptotic methods for modelling of the carriers wave functions in the Si/SiGe heterostructures with quantum-confined layers // J. Phys. Conf. Ser. 2015. V. 586. 012003
7. Sibeldin N. N. Electron-hole liquid in low-dimensional silicon-germanium heterostructures // J. Exp. Theor. Phys. 2016. V. 122. I. 3. P. 587.
8. Akmaev M. A. and Burbaev T. M. Dipolar electron-hole liquid in a double-well SiGe/Si heterosystem // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V.816. 012016

Двумерный полупроводник MoS₂: анализ структуры аморфной фазы методом спектроскопии рентгеновского поглощения

С.А.Рожков¹, В. Прокоп², М. Крбал², А.А. Кононов¹, Ю. Сайто³, П. Фонс⁴, А. В. Колобов^{1,3}

¹ Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена

² Center of Materials and Nanotechnologies CEMNAT

³ National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

⁴ Keio University

Успехи в исследовании графена привели к поиску двумерных материалов с полупроводниковыми свойствами. Одним из результатов этого поиска являются дихалькогениды переходных металлов (ДХПМ) [1]. Была показана перспективность их использования в целом ряде практических применений. ДХПМ - это материалы с химической формулой MX₂, где М – переходной металл, а Х – халькоген.

Широкое практическое применение ДХПМ ограничено в связи с отсутствием их дешевого получения. Одним из способов приготовления материалов является получение кристалла из аморфной фазы. Для этого нужно знать структуру образца в аморфной фазе [2].

В настоящей работе исследована структура аморфных пленок MoS₂, полученных путем импульсного лазерного осаждения (ИЛО) и магнетронного распыления (МР), методом EXAFS (extended X-ray absorption fine structure — протяжённая тонкая структура рентгеновского спектра поглощения) спектроскопии. Данный метод позволяет наиболее полно исследовать локальную структуру материала не только в кристаллическом состоянии, но и в аморфном. Измерения проводились на синхротроне SPring-8 (Япония). Полученные взвешенные спектры EXAFS представлены на рисунках 1 (а, б). Экспериментальные данные структуры данных образцов обрабатывались с использованием программного пакета Demeter [3], включающего инструменты для обработки и анализа результатов.

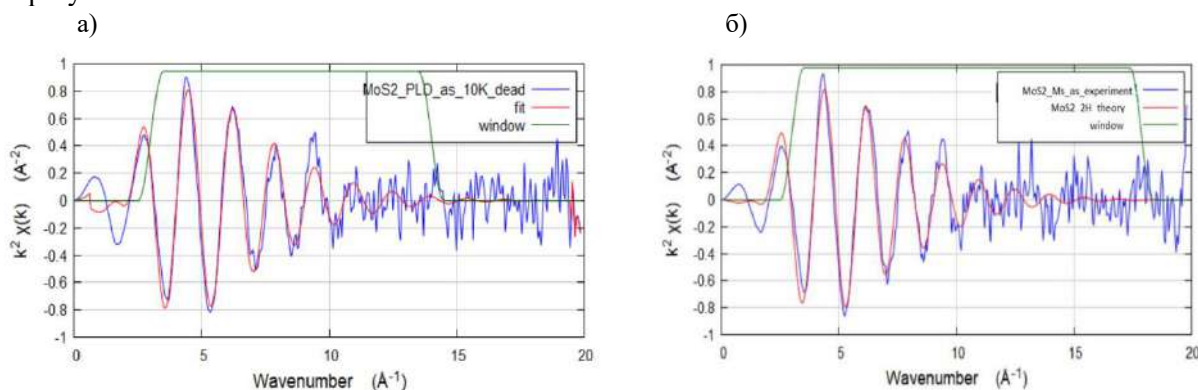


Рис. 1. Взвешенные экспериментальные спектры EXAFS (синий цвет) и построенные в результате подгонки теоретических данных (красный цвет) полученные для образцов MoS₂, напыленных методами ИЛО (а), МР (б).

Для аморфного MoS₂ путем обработки экспериментальных данных спектра XAFS были получены такие данные как число ближайших соседних атомов, межатомное расстояние, среднеквадратичное отклонение в длинах связей. Полученные результаты, а также их сравнение с известными литературными данными для кристаллической фазы будут представлены в докладе на конференции.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 19-53-26017) и Чешского научного фонда (20-23392J)

Литература

1. Kolobov A.V., Tominaga J. Two-dimensional transition-metal dichalcogenides// Springer International Publishing, 2016.
2. Popov A. Disordered Semiconductors: Physics and Applications (second edition)// Pan Stanford Publishing, 2018.
3. Ravel B., Newville M. ATHENA, ARTEMIS, HEPHAESTUS: data analysis for X-ray absorption spectroscopy using IFEFFIT// J. of Synchrotron Rad., 2005, V.12, P. 537-541.

Динамика процесса перемагничивания аморфного магнитного микропровода

Ю.А. Алехина¹, Н.С. Перов^{1,2}

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта

Магнитные свойства аморфных магнитных микропроводов активно исследуются несколько десятилетий. Технологии получения этих объектов оказывают сильное влияние на формирование их магнитных свойств: возникающие в процессе охлаждения расплава механические напряжения приводят к возникновению магнитоупругой анизотропии и, как следствие, сложной доменной структуры. Особенности процессов перемагничивания позволяют использовать аморфные магнитные микропровода в широком спектре практических приложений, включающем сенсорику, устройства записи информации и т.д. [1, 2]. Тем не менее, методики определения объемного распределения намагниченности в микроразмерных объектах ограничены лишь косвенными методами. Наблюдения методами рентгеновской дифракции, позволяющие восстановить микромагнитную структуру объектов, имеют размерные ограничения порядка 5 мкм [3], а также не дают сделать выводы о динамике процесса перемагничивания образцов. Магнитометрические методы позволяют получить достоверные сведения лишь о поверхностных или объемных свойствах материала. Таким образом, для получения представлений о микромагнитной структуре и особенностях процесса перемагничивания необходимо комплексное исследование их свойств различными методами. Кроме того, особую роль в данных условиях приобретает моделирование этого типа объектов, так как оно позволяет визуализировать микромагнитную структуру объекта с заданными характеристиками и сопоставить свойства модельного объекта с экспериментально наблюдаемыми. Исходя из совпадения или расхождения результатов двух подходов можно сделать выводы о соответствии входных данных модели параметрам образцов, исследуемых в эксперименте.

Стоит отметить, что микромагнитному моделированию аморфных микропроводов в настоящее время посвящено малое количество работ. Преимущественно, моделирование этих объектов на данный момент сфокусировано на анализе сложных равновесных микромагнитных структур [4] или топологии доменной границы [5]. Данная работа посвящена моделированию динамики перемагничивания аморфного магнитного микропровода с различными типами доменной структуры внешним однородным магнитным полем, а также электрическим током.

Микромагнитное моделирование проводилось в среде OOMMF [6]. Параметры намагниченности насыщения $M_s \sim 100\text{--}800 \text{ кА/м}$ и обменной жесткости $A \sim 10^{-12} \text{--} 10^{-10} \text{ Дж/м}$ были выбраны исходя из литературных данных о свойствах аморфных сплавов [5,7]. Магнитоупругая анизотропия была задана как векторное поле, величина константы которого $K_{me} = \frac{3}{2} \lambda_s \sigma_{ii}$, где λ_s – константа магнитострикции ($25 \cdot 10^{-6}$ и $-4 \cdot 10^{-6}$ были выбраны в качестве типичных модельных параметров), σ_{ii} – преобладающая компонента тензора упругих напряжений, а направление определялось исходя из направления наибольших растягивающих упругих напряжений и знака константа магнитострикции (векторы совпадают по направлению в случае положительной магнитострикции и ортогональны в случае отрицательной) [8,9].

Равновесное распределение намагниченности, соответствующее минимуму энергии, определялось методом сопряженных градиентов. Полученные в моделировании результаты соответствуют общепринятым концепциям о микромагнитной структуре аморфных микропроводов – центральная часть (кern) намагничена вдоль оси микропровода, а оболочка намагничена радиально или циркулярно для проводов с положительной и отрицательной магнитострикцией, соответственно. Кроме того, на концах микропроводов формируются замыкающие домены, минимизирующие влияние размагничивания.

Изменения намагниченности под действием аксиального или циркулярного магнитного поля определялись решением уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта методом Рунге-Кутты. При приложении аксиального магнитного поля начало процесса перемагничивания микропроводов с положительной магнитострикцией сопровождается ростом замыкающих доменов, что обеспечивает скачок намагниченности – гигантский скачок Баркгаузена. Перемагничивание же проводов с отрицательной магнитострикцией характеризуется появлением осевой компоненты намагниченности в приповерхностной области, что обеспечивает их безгистерезисное перемагничивание. Полученные

результаты соответствуют типичным магнитным свойствам аморфных микропроводов с положительной и отрицательной магнитострикцией.

При приложении циркулярного магнитного поля, что эквивалентно пропусканию тока через образец, было получено переключение намагниченности ядра для микропровода с отрицательной магнитострикцией (Рис. 1). В этом случае, перемагничивание оболочки приводит к изменению направления осевой намагниченности за счет взаимодействия ядра и оболочки.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-32-90089.

Алехина Ю.А. является стипендиатом фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

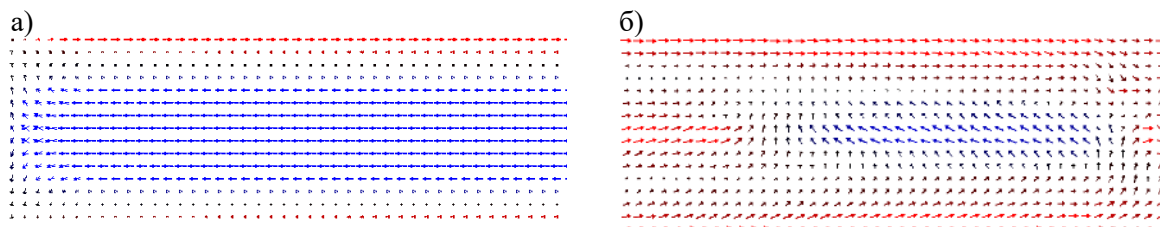


Рис. 1. Микромагнитная структура аморфного магнитного микропровода:

- а) равновесное распределение намагниченности без приложения магнитного поля,
б) распределение намагниченности при пропускании электрического тока – переключение намагниченности ядра.

Литература

1. Hayashi L. *et al.* Dependence of current and field driven depinning of domain walls on their structure and chirality in permalloy nanowires / *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 97 P. 207205.
2. Zhukova V. *et al.* AC-current-induced magnetization switching in amorphous microwires. *Frontiers of Physics.* 2018. V.13. P.137501.
3. Donnelly C. *et al.* Three-dimensional magnetization structures revealed with X-ray vector nanotomography. *Nature.* 2017. V.547. P.328–331.
4. Chizhik A. *et al.* Helical magnetic structures in amorphous microwires: Magneto-optical study and micromagnetic simulations. Book chapter. *Magnetic Nano- and Microwires.* 2020. P. 519–534
5. Richter K., Thiaville A., Varga R., McCord J. The role of uniaxial magnetic anisotropy distribution on domain wall tilting in amorphous glass-coated microwires. *JAP.* 2020. V.127. P.193905.
6. Donahue M.J., Porter D.G. OOMMF User's Guide, Version 1.0. Interagency Report NISTIR 6376, NIST, Gaithersburg, MD. 1999.
7. Chiriac H. *et al.* Internal stress distribution in glass-covered amorphous magnetic wires. *PRB.*1995.V.52, P.10104 – 10113.
8. Chiriac, H., Óvári, T.-A., Zhukov, A. Magnetoelastic anisotropy of amorphous microwires. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* 2003.V. 254-255. P.469–471.
9. Antonov A.S. *et al.* Calculation of residual stresses in amorphous wires. *Glass Physics and Chemistry.* 2000. V.26.P.353-358.

УДК 538.94

Исследование влияния дырочного допирования в соединении EuSn_2As_2

Е.И. Мальцев^{1,2}, В.А. Власенко¹, К.С. Перваков¹

¹Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов, ФИАН

²Высшая школа экономики (национальный исследовательский институт)

Известно, что слоистое соединение SnAs [1] является сверхпроводником с критической температурой $T_c = 3.7 \text{ K}$, а соединение NaSn_2As_2 [2], которое состоит из чередующихся слоев SnAs и Na , тоже является сверхпроводником ($T_c = 1.3 \text{ K}$). В 2017 году было открыто новое соединение EuSn_2As_2 , которое также образовано чередующимися слоями SnAs и Eu , и являющееся антиферромагнетиком. Произведенные в работе [3] расчеты зонной структуры этого соединения показали, что под уровнем Ферми находится много плоских зон, в которых плотность состояний гораздо больше плотности состояний на уровне Ферми. Для смещения уровня Ферми в область плоских зон необходимо допировать систему дырками, заместив часть атомов Eu . Лучше всего для этого подходят щелочные и щелочноземельные элементы, так как обладают меньшим количеством электронов на

внешней оболочке. Среди этих элементов наиболее близкими ионными радиусами с Eu обладают Na и Ca, однако у Ca 4s оболочка полностью заполнена, и это делает его более похожим на Eu по сравнению с Na. Поэтому, чтобы сместить уровень Ферми в область высокой плотности состояний, дырочное допирование было осуществлено заменой части атомов Eu на Ca.

Для получения допированного соединения $\text{Eu}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Sn}_2\text{As}_2$, в перчаточном аргоновом боксе были смешаны металлический Eu, гранулы Ca и предварительно синтезированный прекурсор SnAs в стехиометрическом соотношении и загружены в корундовые тигли. После чего тигли были запаяны в кварцевые ампулы с остаточным давлением Ar около 0.1 ат для подавления диссоциации легколетучих элементов. Кварцевые ампулы были помещены в печь и нагреты до температуры 850 °C, выдержаны в течение 12 часов, а затем медленно, со скоростью 2°C/ч, были охлаждены до температуры 600°C. Выраженные кристаллы обладают слоистой структурой, гладкой зеркальной поверхностью и легко слоятся.

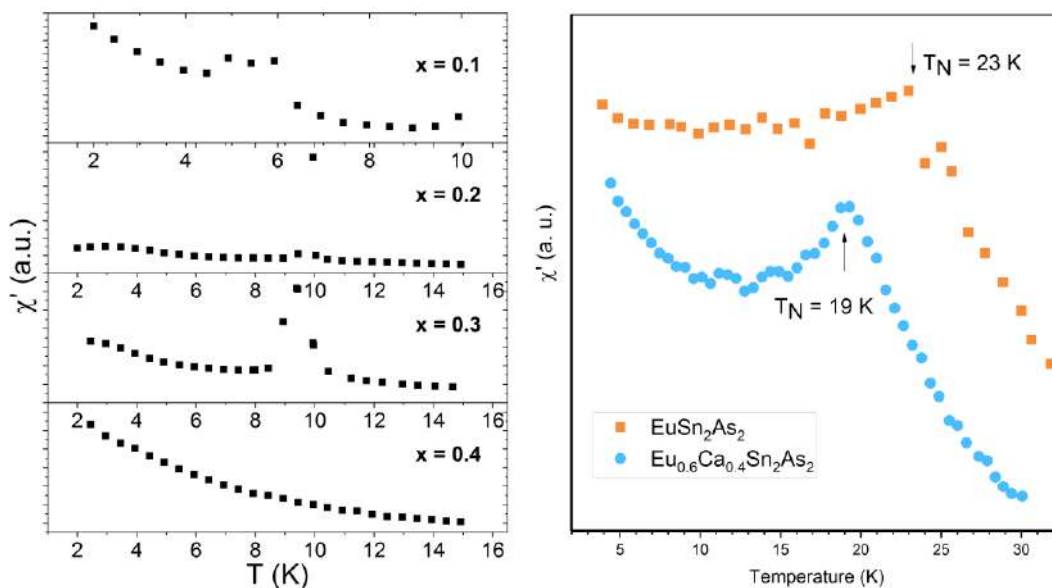


Рис. 4. а) графики зависимости $\chi'(T)$ $\text{Eu}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Sn}_2\text{As}_2$ ($x = 0, 0.4$), б) графики зависимости $\chi'(T)$ образцов $\text{Eu}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Sn}_2\text{As}_2$ ($x = 0.1 - 0.4$)

На установке PPMS-9 бесконтактным методом в переменном магнитном поле с амплитудой 5 Oe измерена зависимость $\chi'(T)$. Магнитная восприимчивость недопированного монокристалла EuSn_2As_2 при уменьшении температуры возрастает, пока не достигает максимума при температуре порядка 23 K, а затем начинает спадать. Пик на кривой магнитной восприимчивости связан с антиферромагнитным упорядочением подрешетки атомов Eu. Полученные данные согласуются с данными, полученными ранее в работе [3]. С увеличением уровня допирования температура антиферромагнитного перехода уменьшается и достигает значения $T_N = 19.3$ K при $x = 0.4$.

Было обнаружено, что в допированных образцах при температуре меньше 10 K на фоне общего хода кривой $\chi'(T)$ возникает ферромагнитный пик. При уровне допирования $x = 0.1$ широкий пик малой интенсивности появляется при температуре примерно 5.4 K. В образце с допированием $x = 0.2$ пик смещен в сторону больших температур и обладает высокой интенсивностью. При дальнейшем увеличении уровня замещенных атомов Eu пик начинает уширяться, а его интенсивность уменьшается, пока совсем не исчезает при $x = 0.4$. Такое поведение может быть связано с тем, что в соединении EuSn_2As_2 между атомами Eu существуют конкурирующие варианты магнитного упорядочения. Атомы Eu, расположенные в разных слоях, стремятся упорядочиться антиферромагнитно. В то время как, атомы Eu внутри одного слоя стремятся образовать ферромагнитную структуру. Допирование Eu атомами Ca влияет на оба варианта. Причем на связь атомов Eu из разных слоев допирование влияет слабее.

В ходе измерения магнитной восприимчивости до температуры 2 K данные образцы не проявили никаких сверхпроводящих свойств. Было обнаружено, что допирование атомами Ca влияет на ферромагнитное взаимодействие атомов Eu внутри слоев сильнее, чем на антиферромагнитное взаимодействие между атомами Eu в разных слоях.

Работа выполнена на базе ЦКП ФИАН в рамках ГЗ №0023-2019-0005

Литература

1. Wang, Yue, *et al.*, Chemistry of Materials, 26.24 (2014): 7209-7213.
2. Goto, Yosuke, *et al.*, Journal of the Physical Society of Japan, 86.12 (2017): 123701.
3. Arguilla, M. Q., *et al.*, Inorganic Chemistry Frontiers 4.2 (2017): 378-386.

УДК 53

Исследование образования пор при растяжении тугоплавких металлов

Д.С. Воронин¹, А.Е. Майер²

Челябинский государственный университет

Высокие температуры и давления, возникающие в ходе высокоскоростного деформирования в волнах разрежения и ударных волнах, позволяют наблюдать и исследовать широкий спектр метастабильных состояний вещества [1]. Растянутый материал – одно из таких метастабильных состояний, выход из которого сопряжен с образованием и ростом полостей. Исследование кинетики образования полостей при динамическом деформировании необходимо для построения механических моделей разрушения металлов.

В данной работе с помощью МД [2, 3] проводилось исследование кинетики образования пор в следующих тугоплавких металлах: тантал, вольфрам и титан. Репрезентативные элементы объема металлов, как с изначально идеальной решеткой, так и с порами, подвергались однородному всестороннему растяжению. На границах объемов задавались периодические граничные условия. МД моделирование проводилось при помощи программы LAMMPS [4] и межатомных потенциалов типа ЕАМ, и для тантала [5], вольфрама [6] и титана [7], соответственно. На начальной стадии подготовки давление релаксировало к нулю при помощи баростата. Температура на стадии подготовки и растяжения поддерживалась с помощью термостата, в различных расчетах варьировалась от 300 до 3000К. Система выдерживалась в течение 10 пс. Далее баростат отключался, и прилагалось растяжение со скоростью деформации 3 нс^{-1} , по всем направлениям. Распределение пор по размерам и их количество определялось при помощи алгоритма, взятого из работы [8].

Результаты МД моделирования использовались для верификации и параметризации модели разрушения. На стадии нуклеации устанавливается экспоненциальное распределение пор по размерам. На стадии коллапса происходит переход к нормальному распределению. В начальный момент разрушения количество пор резко растет, но дальнейшая релаксация давления приводит к коллапсу большей части образовавшихся пор.

Работа поддержана РНФ (проект № 20-79-10229).

Литература

1. Норман Г.Э., Куксин А.Ю., Стегайлов В.В., Янилкин А.В. Многоуровневое моделирование пластичности и разрушения металлов при динамическом нагружении. // Физико - химическая кинетика в газовой динамике. – 2008. – Т. 7. – www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-09-01-009.pdf
2. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids. – Oxford: Clarendon Press, 2002.
3. Шноль Э.Э., Гривцов А.Г. Метод молекулярной динамики в физической химии. – М.: Наука, 1996.
4. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // Journal of Computational Physics. – 1995. – V. 117. – P. 1-19.
5. Ravelo R., Germann T.C., Guerrero O., An Q., Holian B.L. Shock-induced plasticity in tantalum single crystals: Interatomic potentials and large-scale molecular-dynamics simulations // Physical Review B. – 2013. – V. 88(13). – P. 134101.
6. Marinica M.-C., Ventelon L., Gilbert M.R., Provaille L., Dudarev S.L., Marian J., Bencteux G., Willaime F. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2013. – V. 25(39). – P. 395502.
7. Mendelev M.I., Underwood T.L., Ackland G.J. Development of an interatomic potential for the simulation of defects, plasticity, and phase transformations in titanium // The Journal of Chemical Physics. – 2016. – V. 145(15). – P. 154102.
8. Майер А.Е., Майер П.Н. Алгоритм для анализа распределения пор по размерам, основанный на результатах молекулярно-динамического моделирования // Челябинский физико-математический журнал. – 2018. – Т. 3(3). – С. 344–352.

Исследование оптических свойств тонких пленок (Al_2O_3 , ZnO , AZO) / хитозан, изготовленных методом атомно слоевого осаждения

Е.А. Мазницына, К.Ю. Максимова, А.Ю. Гойхман

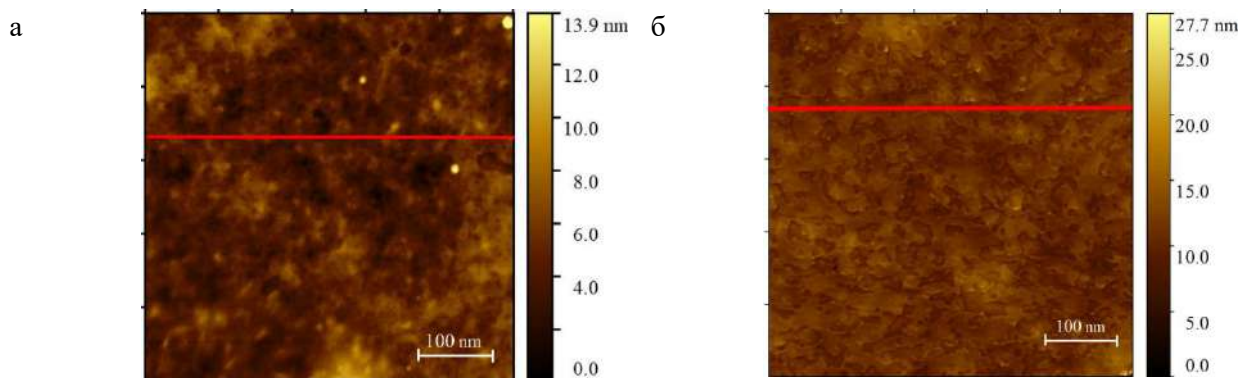
Балтийский Федеральный университет имени Иммануила Канта

Сочетание фаз для производства сложных систем является характерным поведением дикой природы для создания удивительных многофункциональных структур. Неорганические фазы в живых организмах, связанные с органическими фазами, составляют ткани с высокой механической стабильностью. Примером таких композиционных материалов являются кости и экзоскелеты. Неорганические объекты повышают прочность и твердость этих гибридных систем. В то время как органические фазы действуют как связующее в дополнение к множеству других основных биологических функций. Сочетание органической и неорганической фаз встречается практически во всех живых организмах. Гибридные материалы относятся к особому классу материалов, которые достигаются соответствующей комбинацией между двумя или более фазами на наноразмерном или молекулярном уровне для получения конечных материалов с отличными свойствами [1]. Сочетание различных фаз обеспечивает гибридные материалы особыми и исключительными свойствами, которые позволяют им иметь адаптируемое применение. Например, органо-неорганические гибридные материалы демонстрируют свои свойства и преимущества: как органические (эластичные, легкие, гибкие и универсальные) и неорганические объекты (химическая, термическая и механическая стойкость). Эти системы с несколькими свойствами могут использоваться в датчиках, оптике, катализе, электронике, биоматериалах, устройствах преобразования и накопления энергии.

Оксид цинка — это полупроводниковый материал с шириной запрещенной зоны 3,27 эВ и высокой энергией связи экситона 60 мэВ при комнатной температуре. Тонкие пленки на основе ZnO могут быть использованы в качестве, прозрачного проводящего оксида (ППО), УФ-излучателей, модулей солнечных батарей и устройства объемного акустического излучения. Среди различных материалов для применения ППО ZnO легированный Al является особенно перспективным материалом из-за его отличных свойств, таких как более высокая термостойкость, низкие производственные затраты.

В этой работе проводилось исследование роста тонких пленок Al_2O_3 , ZnO и AZO методом атомно слоевого осаждения (АСО) на гладких подложках хитозана. Так как, этот метод позволяет получать высококачественные тонкие пленки при относительно низкой температуре, что делает этот метод очень перспективным для формирования органо/неорганического интерфейса. Все полученные тонкие пленки были сформированы при температуре 100°C. Изучение морфологии поверхности и тонкопленочное соответствие производилось методом атомно силовой микроскопии. Отмечено, что подложка хитозана после отжига в вакуумной камере при $T=100^\circ\text{C}$ деградирует, изменение шероховатости поверхности с 2,2 нм до 1,8 нм (Рис.1).

Оптические свойства изучались в зависимости от типа гибридного интерфейса, а именно тонкие пленки ZnO , AZO на органической подложке хитозана исследовали изменение ширины запрещенной зоны в зависимости от концентрации Al в пленках ZnO .



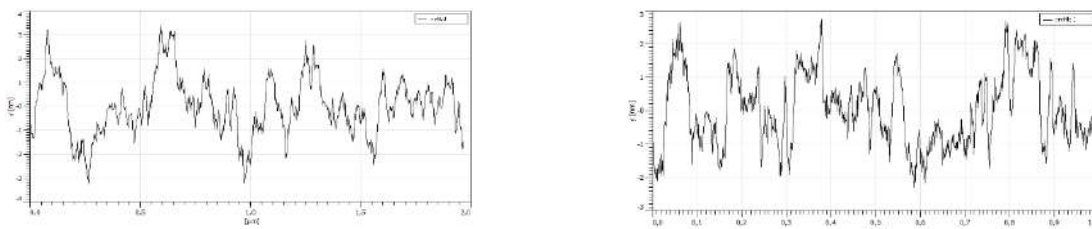


Рис. 1. АСМ изображения поверхности хитозана, демонстрируют:
а- хитозан до испытаний в вакуумной камере;
б- хитозан после 2-х часового отжига при 80°C и давлении 150 мТорр.

Литература

1. S. Pandey, S.B. Mishra, Organic–inorganic hybrid of chitosan/organoclay bionanocomposites for hexavalent chromium uptake, J. Colloid Interface Sci., 361 (2) (2011), pp. 509-520

УДК 532.594

Исследование разворота слоя GaAs в гетероструктурах GaAs/Ge/GaAs для темплейтов оптических нелинейных преобразователей с регулярной доменной структурой

И.П. Казаков¹, С.А. Зиновьев¹, А.В. Клековкин¹, В.А. Сазонов², В.Н. Кукин², Н.И. Боргардт²

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

²Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники»

Гетероструктуры (ГС) GaAs/Ge/GaAs, в которых чередуются латерально расположенные области - домены, развёрнутые друг относительно друга на прямой угол в плоскости поверхности структуры, представляют значительный интерес о области нелинейных преобразований оптических частот. Приборы на их основе позволяют генерировать излучение в среднем ИК и терагерцовом диапазонах [1].

Для синтеза таких ГС используют двухкамерные установки молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) с отдельными ростовыми камерами для выращивания слоёв GaAs и Ge, соединёнными высоковакуумным транспортным узлом, т.к. совмещение этих материалов в одной камере приводит к их перекрёстному легированию. Целью данной работы было создание ГС GaAs/Ge/GaAs на отдельных установках МПЭ для слоев GaAs и Ge с разворотом кристаллической решетки (КР) GaAs на 90° относительно подложки и структурные исследования ГС.

ГС (рис. 1) были выращены на установках МПЭ «Цна-25» и «Катунь» на полуизолирующих подложках GaAs (001) с переносом образцов через атмосферу. Процедура выращивания образцов и анализ условий для возникновения разворота слоя GaAs, расположенного на Ge, представлены в работе [2]. Метод дифракции быстрых электронов (ДБЭ) в процессе роста позволил сделать предположение о развороте слоя №5. Однако данный метод даёт информацию только о структуре поверхностных слоёв толщиной порядка 1 нм, что не позволяет судить о строении слоя на всей его толщине. Эффективным способом определения разворота кристаллической решетки в ГС является анализ дифракционных картин, полученных методом сходящегося пучка. В настоящей работе для выбора оптимальной оси зоны при определении взаимной ориентации кристаллических решеток в слоях GaAs проведено моделирование дифракционных картин в осях зоны [110], [210], [310] и [-130] в программном пакете EMS с использованием формализма блоховских волн [3]. Экспериментальные дифракционные картины, полученные методом просвечивающей электронной микроскопией (ПЭМ), представленные на рис. 2а–г, получены в соответствии с результатами проведенного моделирования от слоев GaAs, расположенных в образцах типа А и Б (с разворотом КР GaAs и без, соответственно) над слоем Ge и под ним.

N	Состав слоев	d, нм	установка МПЭ
7	i-GaAs	20	«Цна-25»
6	i-AlAs	20	
5	i-GaAs	100	
4	Ge	9	«Катунь»

3	i-GaAs	20	«Цна-25»
2	i-AlAs	20	
1	i-GaAs	300	
Подложка GaAs(001) $3^0 \rightarrow (111)\text{Ga}$			

Рис. 1. Схема ГС GaAs/Ge/GaAs. Кристаллическая решётка слоёв 5-7 либо развёрнута под прямым углом в плоскости поверхности подложки (образцы А), либо имеет её ориентацию (образцы Б).

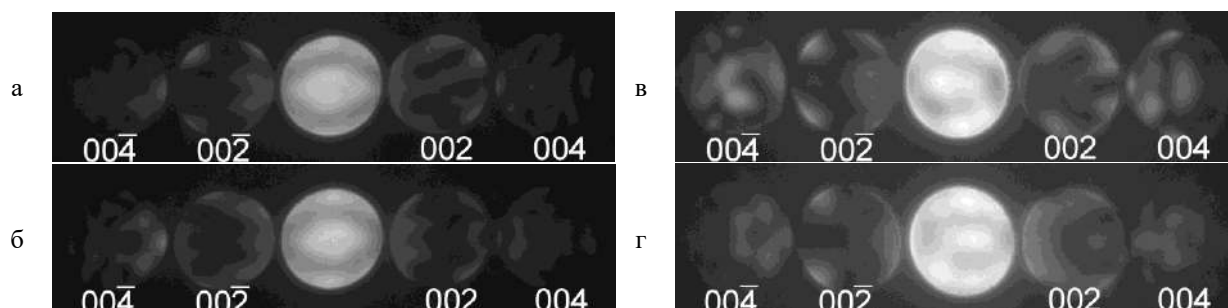


Рис. 2. Экспериментальные дифракционные картины, а – образец А, слой №5; б – образец А, слой №3, в – образец Б, слой №5, г – образец Б, слой №3

Проведенное ПЭМ исследование образца А подтвердило наше предположение о развороте кристаллической решетки слоя №5 относительно слоя GaAs под Ge (слой №3) на 90° . Из рис. 2а и рис. 2б видно, что по сравнению со слоем №3 в слое №5 вид узоров на дифракционных картинах изменился: их изображение в слое №5 стало зеркальным по отношению к слою №3. В образце Б вид узоров в дисках 002 и 00-2, соответствующих слоям GaAs как над Ge (рис. 2в), так и под германием (рис. 2г), не изменялся, что свидетельствовало об отсутствии разворота кристаллических решеток в этих слоях.

Основываясь на результатах исследований ГС, можно сделать заключение, что наличие разворота кристаллической решетки GaAs, расположенной на Ge, было подтверждено двумя методами: ДБЭ и ПЭМ, что свидетельствует о перспективности применяемой нами технологии роста регулярных доменных ГС для нелинейных преобразователей оптических частот.

Литература

1. Yu X. MBE growth of III-V materials with orientation-patterned structures for nonlinear optics. – Stanford University, 2006.
2. Kazakov, I.P., Tsekhosh, V.I., Bazalevsky, M.A. et al. Orientation-patterned templates GaAs/Ge/GaAs for nonlinear optical devices. I. Molecular beam epitaxy. Bull. Lebedev Phys. Inst. 44, 187–191 (2017). <https://doi.org/10.3103/S1068335617070016>
3. Stadelmann, P. A. EMS-a software package for electron diffraction analysis and HREM image simulation in materials science. Ultramicroscopy, 21(2), 131-145 (1987). [https://doi.org/10.1016/0304-3991\(87\)90080-5](https://doi.org/10.1016/0304-3991(87)90080-5)

УДК 538.913

Исследование структуры аморфной фазы двумерного MoS₂ методом первопринципных расчетов

Р.С. Степанов¹, Ю. Сайто², П. Фонс³, А. В. Колобов^{1,2}

¹Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена

²National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

³Keio University

Создание и изучение двумерных материалов в последнее время – очень перспективное направление современного материаловедения. Для таких материалов характерна Ван-дер-Ваальсова щель. Квантово-размерные эффекты и межслоевое взаимодействие приводят к сильной зависимости структуры и свойств от количества слоев, в частности к таким свойствам, как долинная поляризации или топологические эффекты. Дисульфид молибдена MoS₂ обладает оптимальной шириной запрещенной зоны для использования в электронных приборах. Одно из ограничений - это

сложность синтеза двумерного MoS₂ в промышленных масштабах. При условии разработки дешевой технологии получения двумерного дисульфида молибдена, он мог бы обеспечить прорыв в электронике и оптоэлектронике. Один из таких возможных дешевых способов - кристаллизация из аморфной фазы. Для успешного получения MoS₂ данным методом необходимо полностью понимать закономерности структуры аморфной фазы и ее перехода в кристаллическую.

В данной работе мы представляем результаты моделирования аморфного и кристаллического дисульфида молибдена путем расчетов из первых принципов.

В основе теории функционала плотности лежит утверждение о том, что свойства многоэлектронной системы, волновая функция которой зависит от 3N-переменных (N- число электронов), в основном невырожденном состоянии определяются только электронной плотностью, зависящей лишь от трех пространственных координат. Затем, используя приближение Борна-Оппенгеймера, при соответствующем выборе функционала, мы применяем уравнение Кона-Шэма [1], чтобы найти энергию основного состояния и электронную плотность системы взаимодействующих электронов и ионов. Алгоритм расчетов методом теории функционала плотности (рис.1):

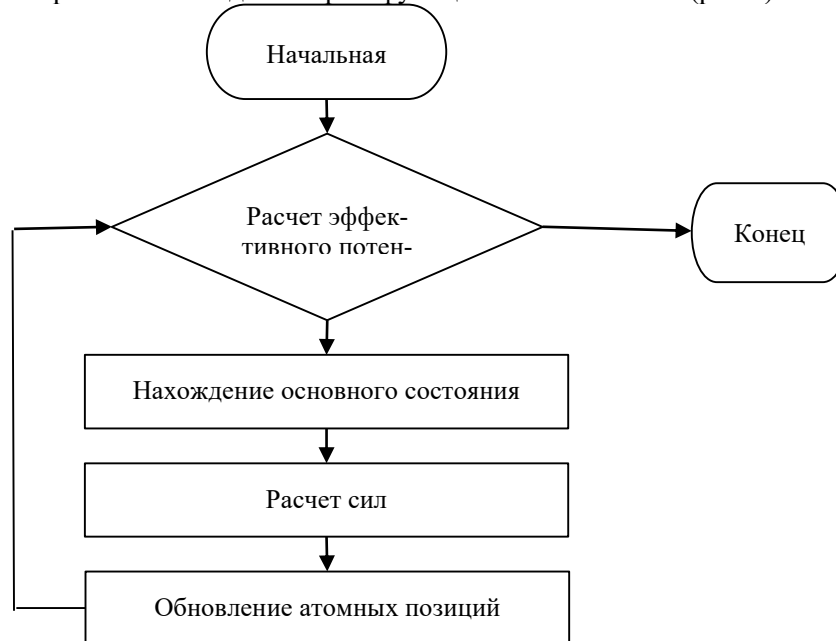


Рис. 1

Нахождение основного состояния заключается в самосогласованном решении уравнения Кона-Шэма:

$$H_{KS} \psi_i = \left(T + V + V_H(n) + V_{XC}(n) \right) \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (1)$$

$$n(r) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(r)|^2 \quad \text{- электронная плотность} \quad (2)$$

$$V_H(n) = \frac{e^2}{2} \int \frac{n(r) n(r')}{|r - r'|} dr' dr \quad \text{- потенциал Хартри} \quad (3)$$

$V_{XC}(n)$ - обменно-корреляционный потенциал

V - нелокальный потенциал (псевдопотенциал) для электронов

В работе был смоделирован процесс плавления и последующей кристаллизации при помощи квантово-механического кода Quantum Espresso [2]. Было использовано обобщенное градиентное приближение GGA [3] и функционал PBE [4]. Ван-дер-Ваальсово взаимодействие было учтено при помощи Grimme-D3 коррекции [5]. Исходную структуру расплавили при температуре 5000 К, термостатировав на протяжении 10 пс, затем охладили до 2200 К за 10 пс, после чего снова охладили до 200 К за 10 пс, тем самым получив аморфную структуру. Далее, для процесса рекристаллизации нагрели до 2000 К и термостатировали в течение 60 пс, охладили до 1800 К за 160 пс, после чего последовательно охладили до 1500 К за 10 пс и до 10 К за 10 пс. В результате продемонстрированы плавление и рекристаллизация с потерей начальной ориентации (Рис.2). При анализе функций радиального распределения выявлена близость локальной структуры, что позволяет предположить,

что кристаллизация из аморфной фазы будет протекать достаточно быстро, и поэтому такой метод может быть перспективным для получения кристаллической фазы MoS₂.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 20-52-50012).

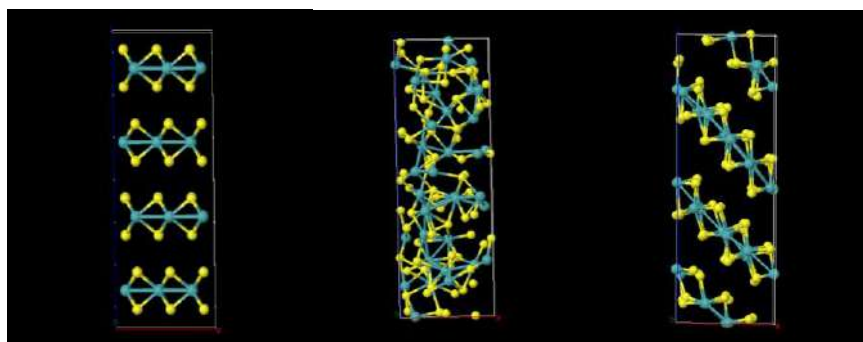


Рис.2. Двумерный MoS₂ в кристаллическом, аморфном и рекристаллизованном состоянии (слева направо)

Литература

1. Kohn W., Sham L. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects.// J. Phys. Rev. A – 1965. – Т. 140. – С. A1133-A1138.
2. Giannozzi P. et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. // J. Phys: Cond. Matter – 2009. – Т. 21. – №. 39. – С. 395502.
3. Burke K., Perdew J. P., Ernzerhof M. Why the generalized gradient approximation works and how to go beyond it //Int. J. Quantum Chem. – 1997. – Т. 61. – №. 2. – С. 287-293.
4. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. // Phys Rev Lett. – 1996. – Т. 77. – №. 18. – С. 3865.
5. Grimme S. et al. J. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu // Chem. Phys – 2010. – Т. 132. – №. 15. – С. 154104.

УДК 538.955

Исследование транспортных свойств планарных структур из топологического изолятора V-Bi_{1.08}Sb_{0.9}Sn_{0.02}Te₂S

Борисов А.Э.¹, Моргун Л.А.²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Топологический изолятор (ТИ) – это изолятор с запрещённой зоной в спектре электронов внутри объема образца ("объёмных" электронов), но с бесщелевыми проводящими состояниями на поверхности, которые образуются благодаря топологически нетривиальной природе зонной структуры.

С момента открытия этого экзотического класса квантовых материалов к нему проявляется интерес как со стороны фундаментальной физики, так и прикладной. Естественным образом встала задача поиска наилучшего объёмного монокристаллического ТИ для изучения свойств поверхностных дираковских электронов, т.е. ТИ с поверхностной точкой Дирака, сильно отличающейся по энергии от "объёмных" электронов, низкой концентрацией таких электронов и надёжным способом выращивания.

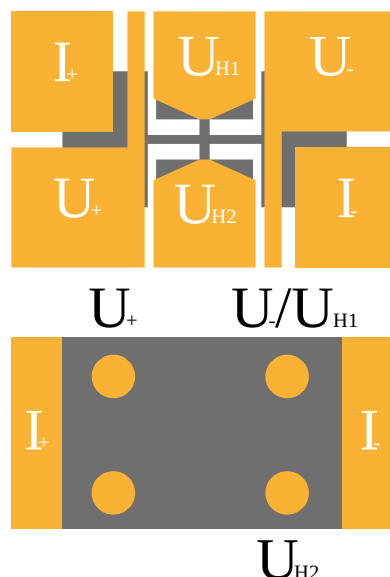


Рис. 1: схема контактов для 4-хточечных измерений: а) микромост, б) макрообразец

На сегодняшний день в данной сфере в основном исследуется допированный $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{Te}_2\text{S}$ (BSTS) [1, 2], обладающий всеми перечисленными свойствами.

В нашей работе мы исследовали как макроскопические образцы, так и микроразмерные мосты из топологического изолятора BSTS, допированного оловом и ванадием (микрометрические образцы получены при помощи фрезеровки фокусированным ионным пучком – FIB, Focused Ion Beam). Размер ионного пучка установки FIB Helios 660 составляет ~ 50 нм, т.е. мы можем получать структуры с размерами менее 1 мкм.

Предварительно были получены размещённые на подложках из текстолита (Al_2O_3) тонкие (2 – 25 мкм) пластины размерами порядка 1×1 мм² из BSTS (механическая эксфолиация), на которые через маски были напылены золотые контакты с подслоем из хрома (схема контактов показана на рис.1). Затем некоторые из них помещались в высоковакуумную камеру FIB, где производилась фрезеровка. Текстолит был выбран из-за своего высокого удельного сопротивления, т.к. для не сверхпроводящих образцов это может быть критичным.

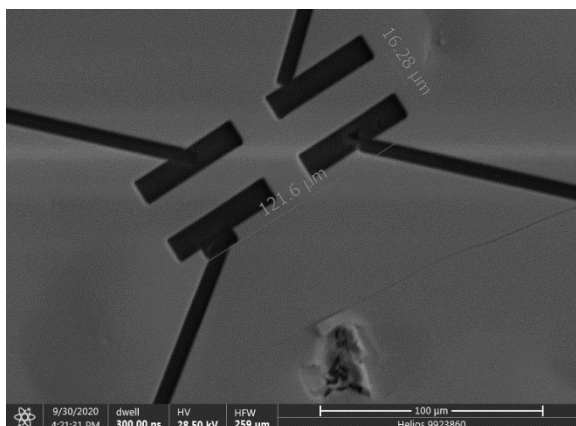


Рис. 2: финальный вид полученного моста

Финальный вид полученных нами микрообразцов представлен на рис. 2. Ширина мостов составляла ~ 10 мкм, длина – до 100 мкм. Важно отметить, что такая конфигурация контактов позволяет измерять сопротивление по четырёхточечной схеме, а не двухточечной, т.е. исключается сопротивление контактов.

Измерение магнитосопротивления образцов показало на макрообразце осциллирующее по полю поведение (рис. 3). Это, вероятно, проявление эффекта Шубникова-де-Гааза. Также смещение максимумов осцилляций при повороте образца относительно магнитного поля (поле оставалось в перпендикулярной образцу и направлению тока плоскости) по закону косинуса (рис. 4) подтвердило, что на эффект влияет только перпендикулярная поверхности образца составляющая магнитного поля.

Период колебаний составил $\sim 0.13 \text{ T}^{-1}$, что позволило оценить двумерную концентрацию носителей заряда $n_{2D} \approx 3.6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Данная оценка хорошо согласуется с результатами, полученными из измерений холловского сопротивления образца ($3.9 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$).

Измерения проводились в широком диапазоне температур (1.5 – 300 K). Амплитуда осцилляций при повышении температуры, как и ожидалось, падала по экспоненциальному закону, однако при температурах ниже 9 K какого-либо заметного изменения амплитуды не наблюдалось. Данный факт, вероятно, можно объяснить качеством образца, но для проверки необходимо дальнейшее исследование этого эффекта на других образцах.

Интересно, что такие же измерения, проведённые на образце микронных размеров, полученного из того же кристалла BSTS, не дали какого-либо видимого результата.

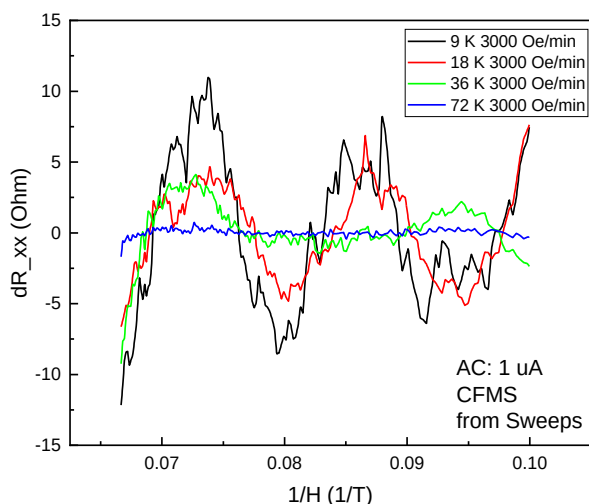


Рис. 3. осцилляции сопротивления макрообразца в зависимости от приложенного перпендикулярного магнитного поля

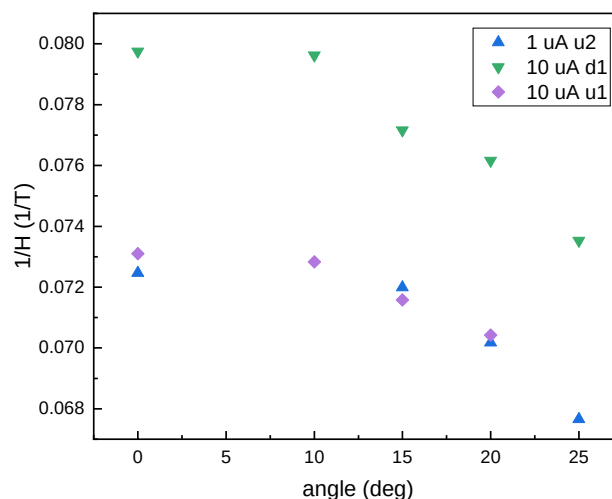


Рис. 4. положение максимума (минимума) осцилляции в зависимости от угла поворота магнитного поля

Литература

1. Lihong Bao et al. Weak Anti-localization and Quantum Oscillations of Surface States in Topological Insulator Bi₂Se₃Te // Scientific Reports volume 2, Article number: 726, 2012
2. S. K. Kushwaha et al. Sn-doped Bi_{1.1}Sb_{0.9}Te₂S bulk crystal topological insulator with excellent properties // Nature Communications volume 7, Article number: 11456, 2016.

УДК 538.958

Исследование фотолюминесценции перовскита CsPbEr_{0.1}Br₃ в магнитном поле

С.Н. Терешко

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Институт физики твердого тела РАН

Перовскиты – это класс веществ, имеющих структуру вида ABX₃, где А и В обозначают катионы, а X – анион (обычно кислород или галогены). В недавних исследованиях перовскиты, где на месте В-катиона был свинец, а роль X-аниона выполняли галогены (Cl, Br и I) продемонстрировали, что они являются перспективными материалами для фотовольтаики и оптоэлектроники [1]. В отличие от классических полупроводников, таких как Si или GaAs у которых большое количество примесных атомов может серьезно испортить их фотолюминесценцию, в перовскитах можно заменить до нескольких процентов атомов примесными без ухудшения их свойств. Так, например, внедрение 7-9% лантанидов на место В-катиона позволило даже улучшить некоторые оптические характеристики свинец-галидных перовскитов, например интенсивность люминесценции и продемонстрировать квантовый выход, превышающий 100% за счет такого явления как quantum cutting[2].

Широкие исследования легированных лантанидами галидных перовскитов начались 5-10 лет назад и исчерпывающей теории, посвященной этим веществам, пока не существует. Тем ценнее различные экспериментальные результаты, которые помогут понять процессы, происходящие

внутри таких материалов. Мной были выполнены измерения кинетики фотолюминесценции перовскита $\text{CsPbEr}_{0,1}\text{Br}_3$ с временным разрешением до 10 пс в нулевом магнитном поле и в полях до 6Т, насколько мне известно, исследований легированных эрбием галидных перовскитов в магнитном поле и с высоким временным разрешением ранее не проводилось.

Исследованные образцы представляли собой монокристалл или несколько скрепленных монокристаллов CsPbBr_3 , в которых 10% свинца было заменено эрбием. Возбуждение проводилось импульсным Ti:Sp лазером, генерирующим на длине волны ~ 852 нм, после которого стоял удвоитель частоты. Излучение фотолюминесценции снималось в геометрии отражения при помощи монохроматора и стрик-камеры. Для изучения влияния магнитного поля, образцы были помещены в криостат со сверхпроводящим соленоидом с магнитным полем до 6 Тл. Измерения выполнялись в геометрии Фарадея.

В спектре фотолюминесценции $\text{CsPbEr}_{0,1}\text{Br}_3$ при $T=2\text{K}$ наблюдается линия излучения на длине волны 534,6 нм. Минимальная наблюдаемая ширина (FWHM) линии излучения составила 1,1 мэВ, что даже несколько меньше, чем в нелегированных образцах. При этом положение линии от точки к точке на образце не менялось. Увеличение мощности накачки приводит к незначительному фиолетовому сдвигу линии на небольшое (~ 200 пс) время, что не отражается на положении линии в целом вплоть до достаточно больших мощностей (рис. 1). В то же время при увеличении мощности накачки, а значит и плотности возбуждаемых частиц увеличивается ширина линии (рис. 1).

Сильное уширение линии излучения при большой плотности возбуждения позволяет нам предположить, что наблюдаемая линия на малых временах задержки отвечает излучению свободных электронов и дырок. В магнитном поле линия излучения испытывают расщепления на две циркулярно поляризованные компоненты, из величины расщепления можно оценить сумму g-факторов для электрона и дырки $g_e + g_h$ в $\text{CsPbEr}_{0,1}\text{Br}_3$. В поле в 5,5 Тл расщепление составляет 0,11 мэВ, что

$$g = \frac{\delta E}{\mu_B B}$$

соответствует величине $= 0,4$.

Образцы были синтезированы в лаборатории “Фотоактивные нанокompозитные материалы” СПбГУ. Выражаю благодарность В.Д. Кулаковскому и А.А. Деменеву за обсуждение результатов и А.В. Емелину за предоставленные образцы.

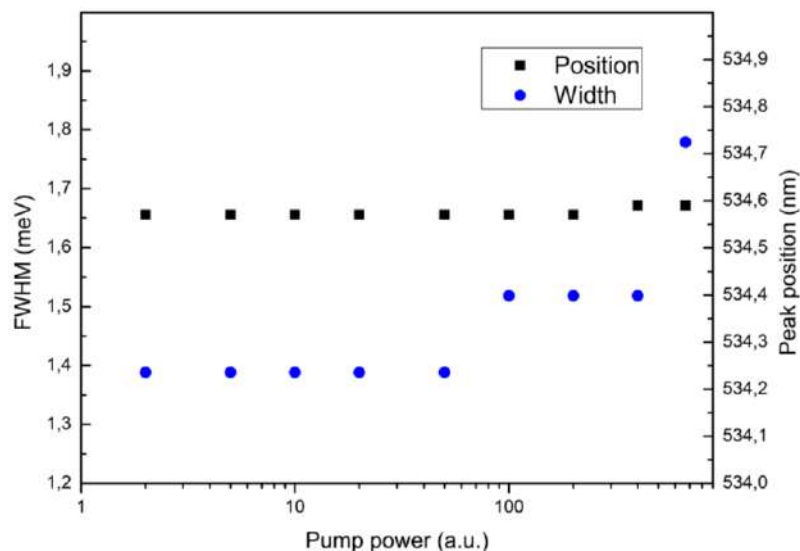


Рис. 1. Зависимость позиции пика и ширины линии излучения $\text{CsPbEr}_{0,1}\text{Br}_3$ от мощности накачки.

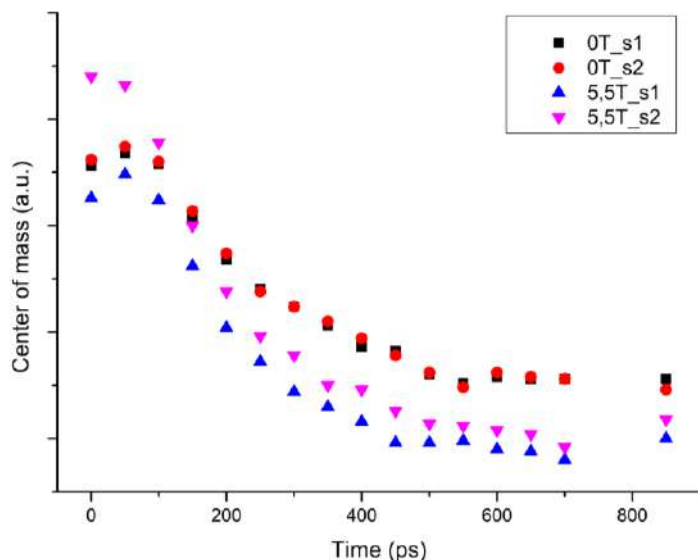


Рис. 2. Временная динамика центра тяжести линии фотолуминесценции $\text{CsPbEr}_{0.1}\text{Br}_3$ в нулевом магнитном поле и ее зеемановских компонент в поле 5,5 Тл.

Литература

1. Manser J.S., Christians J.A., Kamat P.V. Intriguing Optoelectronic Properties of Metal Halide Perovskites // Chem. Rev. 2016, 116, 12956–13008
2. Mir W.J., Sheikh T., Arfin H., Xia Zh., Nag A. Lanthanide doping in metal halide perovskite nanocrystals: spectral shifting, quantum cutting and optoelectronic applications // NPG Asia Materials (2020) 12:9

УДК 539.3

Моделирование высокоскоростного соударения металлических пластин с использованием искусственной нейронной сети в качестве уравнения состояния

Н.А. Грачёва, Е.В. Фомин, А.Е. Майер

Челябинский государственный университет

В данной работе рассмотрена динамика ударной волны, возникающей при высокоскоростном взаимодействии металлических пластин. Моделирование соударения проведено для алюминия, меди и твердого раствора Al-Cu при разных температурах. Для вычисления упругих напряжений использована обученная по данным молекулярно-динамического моделирования глубокая нейронная сеть. Нейронная сеть состоит из 8 скрытых слоев по 25 нейронов в каждом слое (рис. 1). Нейроны входного слоя принимают значения текущей плотности, температуры, концентрации меди в кристалле алюминия. Выходные данные – давление, энергия, объемный модуль упругости K и модуль сдвига G .

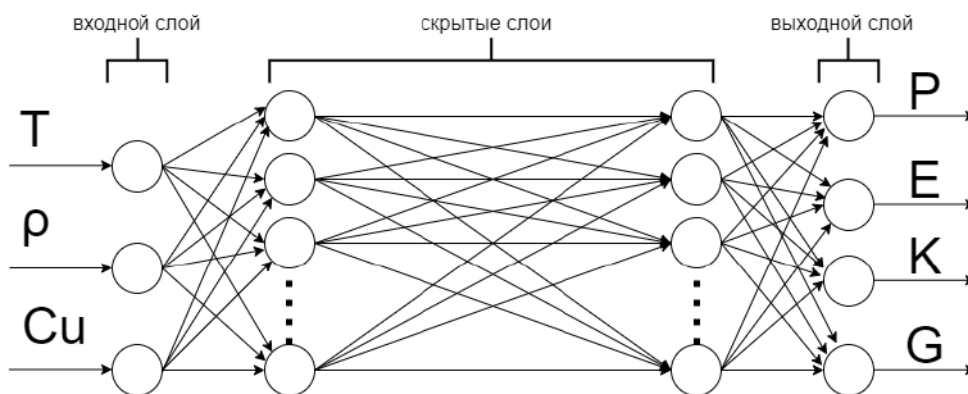


Рис. 1. Схема нейронной сети

Скорость пластической деформации вычисляется по модифицированной релаксационной модели Максвелла [1]:

$$\frac{dw}{dt} = \left(\frac{2}{3} u - w - \frac{Y}{2G} \right) \tau^{-1} H(|S| - Y), \quad (1)$$

где u – компонента тензора макроскопических деформаций. Выражение (1) отлично от нуля, когда касательные напряжения $|S|$ превышают предел текучести материала Y . Рост плотности подвижных дислокаций ρ_D ведет к снижению времени релаксации

$$\tau = \frac{8B}{3\rho_D G b^2}, \quad (2)$$

где B – коэффициент трения дислокаций, b – модуль вектора Бюргерса.

Результаты вычислений сравниваются с экспериментальными данными по измерению скорости свободной поверхности мишени [2] (рис. 2). Верификация нейронной сети проводится сравнением с результатами широкодиапазонного уравнения состояния [3].

Работа поддержана РНФ (проект № 20-11-20153) в части описания пластической деформации и Минобрнауки РФ (гос. задание № 075-00250-20-03) в части разработки уравнения состояния.

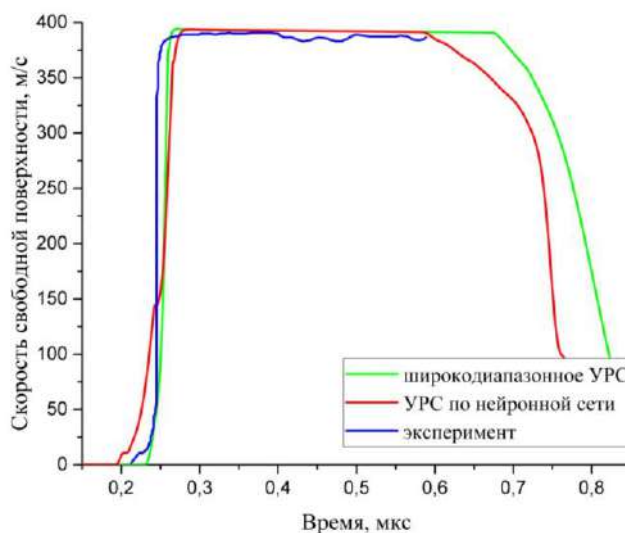


Рис. 2. Профили скорости тыльной поверхности медной пластины при температуре 300К. Размер ударника и мишени 1мм; начальная скорость ударника 395 м/с.

Литература

1. Popova T.V., Mayer A. E., Khishchenko K. V. Evolution of shock compression pulses in polymethacrylate and aluminum // J. Appl. Phys. – 2018. – V. 123, 235902.
2. Zaretsky E.B. and Kanel G.I. Effect of temperature, strain, and strain rate on the flow stress of aluminum under shock-wave compression // J. Appl. Phys. – 2012. – V. 112, 073504
3. Колгатин С. Н., Хачатурьянец А. В. Интерполяционные уравнения состояния. - металлов // ТВТ. 1982. Т. 20; № 3. С. 90-94.

УДК 538.97

Моделирование радиационного воздействия на частицы микросфер Al_2O_3 в программном комплексе GEANT4

А.Н. Дудин¹, В.Ю. Юрина¹, В.В. Нецименко^{1,2}

¹Амурский государственный университет

²Харбинский политехнический университет

Проведено моделирование воздействия радиационного излучения, в виде потока низкоэнергетических протонов, на полые микрочастицы Al_2O_3 , с расчетом концентрации образовавшихся первичных дефектов вакансия-междоузельный атом (пара Френкеля). Моделирование воздействия протонов на полые частицы проводилось с использованием методов Монте-Карло в программном пакете GEANT4 [1].

Объект исследования, в виде полый микрочастицы Al_2O_3 , имел сферическую форму с диаметром – 3000 нм и толщиной стенки – 50 нм (рис.1). Данные формы собирались в ансамбль, представляющий из себя пластину с параметрами $2.4 \times 21 \times 21$ мкм, со смещенным центральным слоем на 1.5 мкм вдоль плоскости YZ, по типу ГЦК-упаковки. Генерация пучков частиц носило моноэнергетический характер. Профиль интенсивности пучка описывается гауссовым распределением. Бомбардирующие частицы (протоны) с энергией 100 кэВ падали под прямым углом относительно нормали к поверхности, с флюенсом $5 \cdot 10^9$ см². Пороговая энергия смещения в соединении Al_2O_3 для атома алюминия – 50 эВ, для кислорода – 100 эВ [2]. Регистрация рожденных частиц осуществлялась на всем протяжении моделируемого объема. При моделировании учитывались процессы используемые в наборе физики emstandard_opt3, такие как: ионизация среды, множественное рассеивание частиц на атомах мишени, упругие и неупругие потери энергии, тормозное излучение.

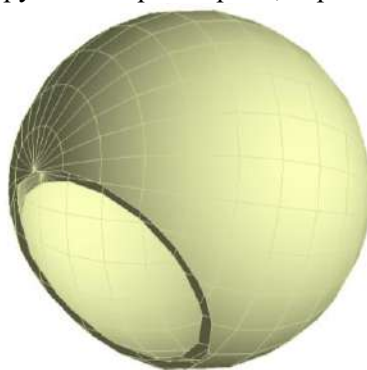


Рис. 1. Микросфера Al_2O_3 смоделированная в GEANT4

Концентрация первичных дефектов рассчитывалась с использованием модифицированной Зигмундом [3] формулы Кинчина – Пиза [4]:

$$N_{fr} = \frac{E_{dis}(\varepsilon)}{2.5E_d}, \quad (1)$$

здесь $E_{dis}(\varepsilon)$ – диссипируемая энергия в ядерных столкновениях, E_d – пороговая энергия смещения. Предполагается, что атомы мишени при соударениях ведут себя как твердые шары, соответственно столкновение рассматривается как изолированные акты упругого соударения двух частиц.

На рис. 2 изображен процесс прохождения пучка протонов с энергиями в 100 кэВ и флюенсом в $5 \cdot 10^9$ см², через ансамбль полых микросфер Al_2O_3 .

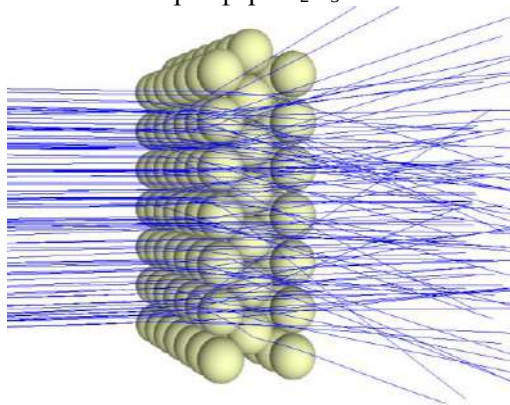


Рис. 2. Моделирование прохождения пучка протонов с энергией 100 кэВ через ансамбль микросфер Al_2O_3

Результаты численных расчётов воздействия радиационного излучения на ансамбль микросфер Al_2O_3 дают значение для длины свободного пробега протона равную 2.461 Å. Общее количество первично выбитых атомов (ПВА) при прохождении пучка протонов с флюенсом $5 \cdot 10^9 \text{ см}^2$ равно 758676 см^3 . Концентрация образовавшихся первичных дефектов (пар Френкеля) – $5.337 \cdot 10^{18} \text{ см}^3$.

Представленные экспериментальные данные в работе [5] демонстрируют, меньшую отражательной способности микро- и наночастиц во всем спектральном диапазоне, а также высокую радиационную стойкость. Предположительно, данная особенность микросфер обусловлена отсутствием материала в их объеме, в результате чего радиационные дефекты образуются в поверхностном слое частиц. Таким образом, разработанная модель позволяет исследовать радиационную стойкость полых микросфер Al_2O_3 при облучении протонами.

Литература

1. Agostinelli S., [et al.] GEANT4 - a simulation toolkit // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2003. V.506. P. 250.
2. Rau E.I., [et al.] Electron-beam charging of dielectrics preirradiated with moderate-energy ions and electrons // Physics of the Solid State. 2007. V. 59. P. 1526-1535.
3. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The stopping and range of ions in solid // New York: Pergamon. 1985. P. 256.
4. Kinchin G.H., Pease R.S. The displacement of atoms in solids by radiation // Rep. Prog. Phys. 1955. V. 18. P. 1-14.
5. Юрина В.Ю., Нецименко В.В., Чундун Ли. Оптические свойства и радиационная стойкость микро-, наночастиц и микросфер Al_2O_3 // М: Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2020. №. 3. С. 46-52.

УДК 620.186

Модификация поверхности алюминиевого сплава АК12ММгН методом микродугового оксидирования

Н. А. Дубровина

Белгородский государственный национальный исследовательский университет, г. Белгород

Показана возможность создания многофункциональных, высокотвердых, защитных, износостойких и теплозащитных покрытий методом микродугового оксидирования (МДО) на алюминиевом сплаве АК12ММгН. Установлено влияние технологических режимов и состава электролита на структуру и состав получаемого покрытия.

Для формирования оксидного покрытия была использована установка ЭЛС МДО-50-АКТ-001. Оксидирование проводилось в щелочных электролитах с добавлением жидкого стекла. Исследования проводились на пяти образцах, режимы, обработки которых указаны в табл. 1.

№ образца	С, мкФ	τ, мин	Электролит, г/л	
			КОН	Жидкое стекло
1	78	60	4	9
2	78	120	10	4
3	100	60	10	4
4	78	60	10	30
5	78	90	7	20

Таб. 1. Режимы обработки исследуемых образцов

На рис. 1 представлены образцы с покрытием, полученные методом МДО при различных режимах. Структура покрытия состоит из нескольких слоев (переходный 3-5 мкм, рабочий 70-120 мкм, технологический 30 мкм) формирование которых характерно для случая использования метода МДО на алюминиевых сплавах [1, 2]. В местах расположения кремнийсодержащей фазы Al_7Si

наблюдается наибольшая пористость покрытия, в области переходного слоя образца 1 (рис. 1, а) показана стрелкой.

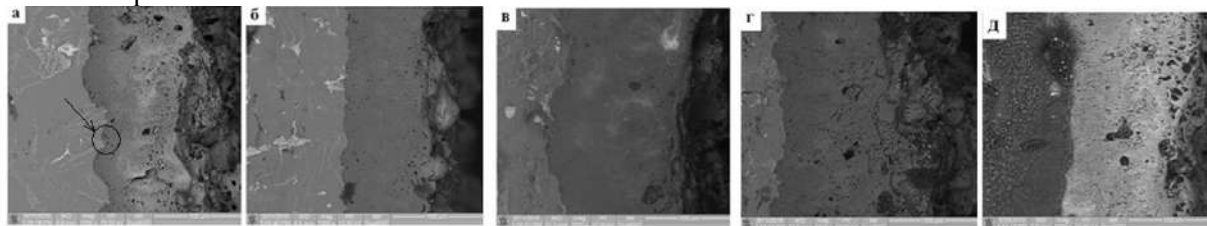


Рис. 1. Покрытия методом ГПМ на сплаве АК12ММgН: а- №1; б - №2; в - №3; г - №4; д - №5 (поперечное сечение, режим обратно-рассеянных электронов).

Характерна для всех исследованных образцов рентгенограмма верхнего рыхлого технологического слоя является рентгеноаморфная фаза. Рабочий слой согласно данным РФА (рис.2) представлен муллитом и оксидом алюминия различных модификаций: α , γ и δ . Именно вследствие выделения данных фаз рабочий слой отличается высокой твердостью 1000-1500 HV, по сравнению с остальными слоями: переходный слой ~300HV; технологический слой 700-750 HV.

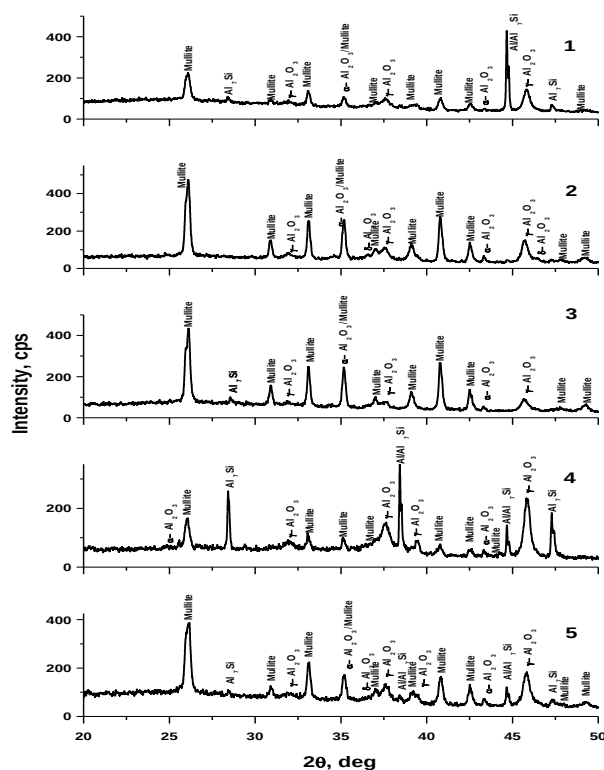


Рис.2. Рентгенограммы рабочего слоя нанесенных покрытий различных режимов обработки.

Таким образом, МДО позволяет получить на поверхности алюминиевых сплавов покрытие с различными свойствами, в состав которого входят γ - и α -фазы оксида алюминия, муллит (в случае легирования сплава кремнием) и так далее. Корунд (α -фаза) обладает низкими коэффициентом трения и теплопроводностью, что повышает износостойкость пары трения, уменьшает отвод тепла и обеспечивает высокую теплостойкость. При этом он обладает большей твердостью по сравнению с γ -фазой оксида алюминия. С другой стороны, наличие γ -фазы позволяет в некоторой степени повысить стойкость покрытия к циклическим механическим и термическим нагрузкам. Муллит в свою очередь обладает низкой плотностью, высокой термической стабильностью и коррозионной стойкостью, низкой теплопроводностью, приемлемыми значениями прочностных характеристик.

Образец №3 имеет низкую пористость и толщину рабочего слоя 110 мкм, следовательно, он обладает большей механической прочностью и износостойкостью. Наилучшими теплоизоляционными характеристиками обладает образец №5.

Литература

1. Plasma electrolytic surface modification of metals and alloys. Vol.2 M.:Technosphere. (2011). (in Russian) [Плазменно-электролитическое модифицирование поверхности металлов и сплавов. Том 2. М.: Техносфера. (2011)]
2. Tihonenko V.V., Shkilko A.M.. Diagnostics the outer layer of the coating produced microarc oxidation on aluminum alloys. 119-125 (2010).

УДК 537.622.4

Особенности фазового перехода в тонких пленках FeRh

А.С. Комлев¹, В.И. Зверев¹, Н.С. Перов^{1,2}

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²Балтийский федеральный университет им. Канта

Одним из важных направлений в физике магнитных явлений и магнитных материалов является магнитокалорика – раздел, в котором изучается взаимосвязь магнитных и тепловых явлений в веществе [1]. Знание характеристик материалов, связанных с этими явлениями, является актуальным для многочисленных практических применений [2]. Одним из наиболее известных применений магнитокалорического эффекта является технология магнитного охлаждения. Основной проблемой для внедрения магнитных рефрижераторов является высокая стоимость источников магнитного поля, а также то обстоятельство, что свойства большинства магнитокалорических материалов – потенциальных кандидатов в качестве рабочего тела магнитных холодильников – существенно образом зависят от дефектов стехиометрии и структуры [3], а также методов приготовления образцов [4], что также увеличивает стоимость создаваемых прототипов магнитных рефрижераторов.

Максимальное адиабатическое изменение температуры измерено в сплаве Fe₄₉Rh₅₁ [5]. Этот бинарный сплав интересен с исследовательской точки зрения, так как, раскрыв причину аномально большого эффекта в нем, можно спрогнозировать структуру, состоящую из другого набора атомов, которая соответствовала бы заранее заданным параметрам. Существует ряд работ, в которых описано влияние структуры, внешних деформаций на магнитокалорические свойства рассматриваемого сплава [2,3]. Однако, для построения теории магнитных фазовых переходов первого рода в таких системах необходимо комплексное экспериментальное изучение их свойств. Большинство опубликованных работ, в которых исследуется соединение FeRh посвящено объемным сплавам. Размерные эффекты могут существенно повлиять на свойства образца, поэтому исследование тонких пленок, применение которых актуально в медицинских приложениях [6], также является важной задачей.

В данной работе исследуется тонкая пленка FeRh толщиной 56 нм. Измерения магнитных свойств были проведены при помощи вибрационного магнитометра VSM LakeShore 7404. Были получены полевые и температурные зависимости намагниченности, из которых определена дисперсия температуры фазового перехода АФМ-ФМ. С помощью классических термодинамических соотношений Максвелла из данных о намагниченности при различных температурах был рассчитан магнитокалорический эффект. Более подробно температурный гистерезис фазового перехода был изучен при помощи TFORC (Temperature First Order Reversal Curve) анализа. Интерпретация результатов, полученных при помощи данной методики описана в статье [7] и базируется на модели Бина – Родбела [8]. На рисунке 1а показаны измеренные TFORC кривые, на рисунке 1б изображена соответствующая TFORC диаграмма, которая иллюстрирует процесс перемангничивания системы при изменении температуры из начального метастабильного состояния.

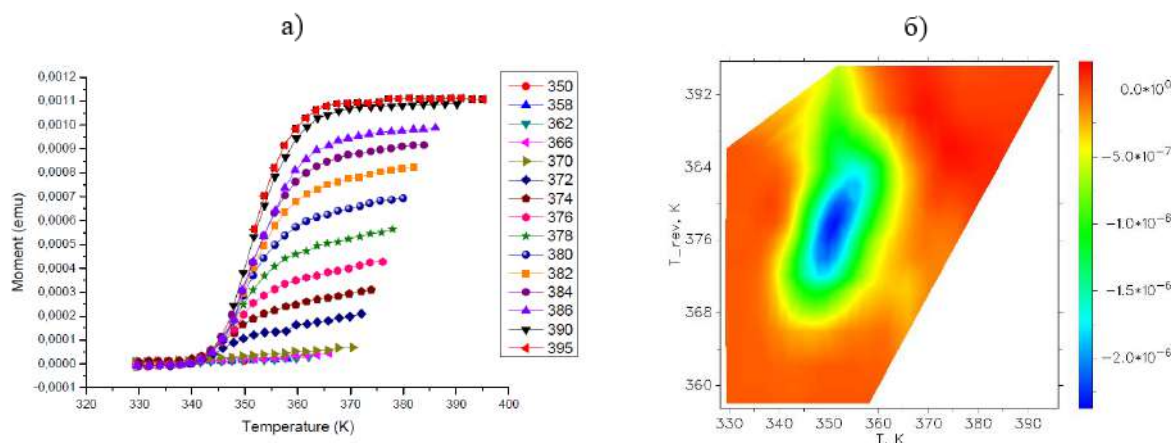


Рис. 1 а) TFORC кривые в поле 1кЭ б) TFORC диаграмма

Анализ TFORC диаграммы позволяет определить состояние системы, при котором наблюдается максимальный обмен между антиферромагнитной и ферромагнитной фазами в пленке. Этот факт подтверждается увеличением коэрцитивности системы более чем в два раза при нахождении исследуемого образца в состоянии, соответствующему минимуму производной на TFORC диаграмме. В итоге, используя представленные в этой работе методики можно определить состояние системы, при котором в ней проявляется максимальное взаимодействие между ферромагнитной и антиферромагнитной фазами при фазовом переходе.

Комлев А.С. является стипендиатом Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

Литература

1. Zarkevich N.A., Zverev V.I., *Viable Materials with a Giant Magnetocaloric Effect: 9* // Crystals. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, 2020. V. 10. P. 815.
2. Tishin A.M., Spichkin Y.I. *The Magnetocaloric Effect and its Applications*. IOP Publishing, Bristol, 2003.
3. Zverev V.I. *et al.* Influence of structural defects on the magnetocaloric effect in the vicinity of the first order magnetic transition in Fe_{50.4}Rh_{49.6} // *Applied Physics Letters*. 2016. V. 108. P. 192405.
4. Sánchez-Valdés C.F. *et al.* The effect of cooling rate on magnetothermal properties of Fe₄₉Rh₅₁ // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2020. V. 498. P. 166130.
5. Nikitin S.A. *et al.* The magnetocaloric effect in Fe₄₉Rh₅₁ compound // *Physics Letters A*. 1990. V. 148. P. 363.
6. Гумаев Р. Р., Ваулин А. А., Губкин А. Ф., Зверев В. И. ОСОБЕННОСТИ МАГНИТНЫХ И МАГНИТОТЕПЛОВЫХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ Fe–Rh В ОБЛАСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА АНТИФЕРРОМАГНЕТИК–ФЕРРОМАГНЕТИК // *ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ*. 2020. Т. 121, № 9. с. 1.
7. Moreno-Ramirez L.M., Franco V. Setting the Basis for the Interpretation of Temperature First Order Reversal Curve (TFORC) Distributions of Magnetocaloric Materials // *Metals*. 2020. V. 10 P. 1039.
8. Valiev E. *et al.* Application of the exchange-striction model for the calculation of the FeRh alloys magnetic properties // *Intermetallics*. 2019. V. 108. P. 81.

УДК 53.06

Оценка подвижности ДЭГ при реализации спин – поляризованного транспорта в гетероструктуре AlSb/InAs/AlSb

Е.Р. Бурмистров¹, М.М. Афанасова²

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

²Рязанский государственный университет имени С.А. Есенина

Целью данной работы является создание математической модели, позволяющей рассчитать конструктивные параметры двумерного электронного газа при спин - поляризованном транспорте. В качестве исследовательской задачи определена попытка оценить ширину (L) слоя InAs, при которой аналоговый сигнал несёт качественную информацию об изучаемой гетероструктуре AlSb/InAs/AlSb. Установлено, что при ширине активного слоя, равного 15 нм подвижность и квантовое время имеют наиболее перспективные в применении значения.

В настоящей работе предложена адаптированная к гетероструктуре AlSb/InAs/AlSb математическая модель по расчёту эффективной подвижности $\bar{\mu}$ и квантового времени τ_q ДЭГ при рассеянии на шероховатостях в гетероструктуре AlSb(δ -Te)/InAs/(δ -Te)AlSb в условиях квантующих магнитных полей, а также при межподзонной релаксации. Полученные данные позволили оценить оптимальную ширину активного слоя InAs, при которой достигается наилучшее быстродействие прибора.

Для гетероструктуры AlSb(δ -Te)/InAs/(δ -Te)AlSb с двумя заполненными подзонами время релаксации определяется на основании [1]

$$1/\tau_0 = (K_{00}K_{11} - K_{01}K_{10})/(E_{F_0}K_{11} - E_{F_1}K_{01}), 1/\tau_1 = (K_{00}K_{11} - K_{01}K_{10})/(E_{F_1}K_{00} - E_{F_0}K_{10}), \quad (1)$$

где K_{00}, K_{11} - компоненты тензора рассеяния, характеризующие вклад первой и второй подзоны в процессы релаксации. Указанные тензоры позволяет вычислить кинетическое уравнение Больцмана [1]

$$K_{ij} = \delta_{ij} \sum_i K_{ij}^1 - K_{ij}^2, \quad (2)$$

$$K_{ij}^1 = \frac{k_{F_i}^2}{2\pi\hbar} \int_0^\pi |V_{ij}(q_{ij})|^2 d\vartheta, \quad K_{ij}^2 = \frac{k_{F_i}k_{F_j}}{2\pi\hbar} \int_0^\pi \cos\vartheta |V_{ij}(q_{ij})|^2 d\vartheta. \quad (3)$$

в котором

Матричный элемент рассеяния на шероховатостях имеет вид [2]:

$$|V_{ij}(q_{ij})|^2 = \pi\Delta^2\Lambda^2\Delta V^2 \exp(q_{ij}^2\Lambda^2/4) \left\{ \sum_{n,m} (\varepsilon^{-1})_{ij,nm} \varphi_i(z_b) \varphi_j(z_b) \right\}^2, \quad (4)$$

где $V_{ij}(q_{ij}), \tilde{V}_{nm}(q_{ij})$ - матричные элементы экранированного и неэкранированного кулоновского потенциала; $\varepsilon_{ij,nm}$ - матрица диэлектрической проницаемости; Δ, Λ - параметры шероховатости; $\varphi_i(z_b), \varphi_j(z_b)$ - подзонные волновые функции в барьере; $q_{ij} = (\vec{k}_{F_i}^2 + \vec{k}_{F_j}^2 - 2\vec{k}_{F_i}\vec{k}_{F_j} \cos\vartheta)^{1/2}$ - изменение волнового вектора, обусловленное упругим рассеянием от i к j подзоне.

Матрица диэлектрической проницаемости определяется [1]

$$\varepsilon_{ij,nm} = \delta_{in}\delta_{jm} + (q_s/q_{ij})H_{ij,nm}(q_{ij})\chi_{ij}(q_{ij}), H_{ij,nm}(q_{ij}) = \int_0^\infty \int_0^\infty dz' \varphi_i(z) \cdot \varphi_j(z) \times \exp(-q_{ij}|z-z'|) \cdot \varphi_n(z') \cdot \varphi_m(z'),$$

$$\chi_{ij}(q) = \begin{cases} 1 - \Theta(q_{ij} - 2k_{F_i}) \sqrt{1 - \left(\frac{2k_{F_i}}{q_{ij}}\right)^2}, & i = j \\ \frac{q_{ij}^2 + k_0^2 - \sqrt{(q_{ij}^2 + k_0^2)^2 - (2q_{ij}k_{F_i})^2}}{2q_{ij}^2}, & k_{F_i} \leq k_0, i \neq j \\ 1 - \frac{\Theta(q_{ij} - k_+)}{q^2} \sqrt{(q_{ij}^2 - k_+^2)(q_{ij}^2 - k_-^2)}, & k_{F_i} > k_0 \end{cases}, \quad (5)$$

где $H_{ij,nm}(q_{ij})$ - форм-фактор; $\chi_{ij}(q_{ij})$ - матрица статической поляризации; Θ - функция Хевисайда; $m^* = 0.033m$ - эффективная масса электрона;

$$q_s = m^*e^2/2\pi\varepsilon_s\varepsilon_0\hbar^2, \quad k_0^2 = 2m^*(E_1 - E_0)/\hbar^2, \quad k_+ = |k_{F_0} + k_{F_1}|, \quad k_- = |k_{F_0} - k_{F_1}|. \quad (6)$$

При расчёте значений подвижности ДЭГ в легированных гетероструктурах AlSb(δ -Te)/InAs/(δ -Te)AlSb необходимо учитывать вклад каждой подзоны в канал проводимости. Подвижность в i -й подзоне при нулевой температуре можно оценить с помощью

$$\mu_i = e(\tau_q)_i/m^*. \quad (7)$$

Учёт влияния каждой подзоны в канал проводимости можно получить, применяя в расчёте

$$\bar{\mu} = \sum_i (\mu_i N_i) / N_s, \quad (8)$$

эффективную подвижность

где N_i, N_s - концентрация электронов в i -й подзоне и атомов примеси Те в инверсионном слое соответственно. Дальнейший расчет на основании изложенных формул позволил оценить общее время жизни τ_q , концентрацию и время жизни на подзонах (основной n_m, τ_q^m и возбужденной τ_q^p, n_p) и подвижность двумерных носителей гетероструктуры AlSb(δ -Te)/InAs/(δ -Te)AlSb (таблицы 1).

Серия образцов	Теоретический расчёт			
	$\tau_q, 10^{-14} \text{с}$	$\tau_q^p, 10^{-12} \text{с}$	$\tau_q^m, 10^{-12} \text{с}$	$\bar{\mu}, \text{м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$
1	4.364	0.566	1.894	8.632
2	3.411	0.476	1.839	9.410
3	2.935	0.400	1.198	11.433
4	2.678	0.413	1.101	10.694

Таб.1. Аналитические и теоретические данные, полученные в ходе исследования, для серии образцов

В целях расчёта оптимальной ширины активного слоя InAs (L) была предпринята попытка оценить эффективную подвижность ДЭГ при разных значениях L . Теоретические результаты, полученные на основании формулы (9), приведены в таблице 2. Важно отметить, что формирование композитных наноструктур следует проводить в рамках допустимого диапазона значений L . Дальнейший рост ширины InAs приводит к резкому снижению значений параметра τ_q и может стать основным фактором ограничивающим реализацию квантово - размерных эффектов в гетероструктуре.

Серия образцов	$L, \text{нм}$			
	15	17	19	21
1	8.632	10.341	12.040	14.930
2	9.410	11.111	11.631	13.870
3	11.433	12.288	14.152	17.622
4	10.694	11.930	12.466	15.143

Таб. 2. Значения подвижностей ДЭГ в AlSb/InAs/AlSb в зависимости от ширины квантовой ямы.

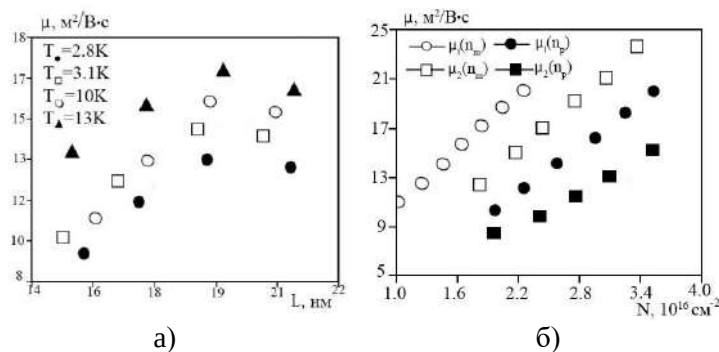


Рис.1. а) Зависимость эффективной подвижности от ширины InAs для серии образцов; б) Зависимость эффективной подвижности от концентрации электронов на подзонах гетероструктуры InAs/AlSb

Таким образом, предложенная модель позволяет оценить подвижность ДЭГ, квантовое время и ширину активного слоя с хорошей точностью.

Литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Т.3. 1963.
2. Burmistrov E.R., Afanasova M.M. SN Applied Sciences - DOI: 10.1007/s42452-020-03273-1.

Плазменные возбуждения в частично экранированных двумерных электронных системах

А.М. Зарезин^{1,2}, В.М. Муравьев¹, П.А. Гусихин¹, И.В. Кукушкин¹

¹Институт физики твердого тела РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Интерес к плазменным возбуждениям в электронных системах пониженной размерности связан с рядом уникальных свойств, отсутствующих у аналогичных возбуждений в трехмерном случае. В частности, плазмоны в двумерных электронных системах (ДЭС) обладают бесщелевым, корневым в квазистатическом пределе, законом дисперсии [1]:

$$\omega_p(q) = \sqrt{\frac{n_s e^2}{2\varepsilon\varepsilon_0 m^*}} q, \quad (1)$$

где q - волновой вектор плазмона, n_s - концентрация двумерных электронов, e - заряд электрона, ε и ε_0 - диэлектрическая проницаемость окружения ДЭС и диэлектрическая постоянная, соответственно, m^* - эффективная масса электронов. Частоту соответствующих плазменных возбуждений можно изменять в широком диапазоне, меняя концентрацию двумерных носителей заряда или прикладывая магнитное поле перпендикулярно ДЭС [2]. На спектр двумерных плазмонов также оказывает существенное влияние диэлектрическое окружение ДЭС. В частности, нанесение металлического затвора, полностью экранирующего ДЭС, приводит к изменению спектра 2D плазмонов с корневого на линейный [2]:

$$\omega_{\text{screened}}(q) = \sqrt{\frac{n_s e^2 h}{\varepsilon\varepsilon_0 m^*}} q, \quad (2)$$

где h - расстояние от ДЭС до затвора.

Несмотря на активное теоретическое и экспериментальное исследование плазмонов в рассматриваемых системах, оказалось, что в частично экранированных ДЭС присутствует семейство плазменных возбуждений, не исследованное ранее и отличающееся от случаев полностью экранированных и неэкранированных ДЭС. Плазменные возбуждения в частично экранированных ДЭС с затворами различной конфигурации недавно были исследованы экспериментально [3-6] и рассмотрены теоретически [7-8], получив название «проксимити» плазмоны (proximity plasmons).

В настоящей работе представлено исследование плазменных возбуждений в частично экранированных ДЭС с затвором в форме полосы с большим отношением длины к ширине и в форме диска. Схематический вид образцов показан на верхних вставках к рисункам 1а и 1б. Эксперименты проводились на GaAs/AlGaAs гетероструктурах. Плазменные резонансы детектировались с помощью бесконтактной неинвазивной оптической методики, основанной на высокой чувствительности спектра люминесценции двумерного электронного газа к резонансному разогреву ДЭС. Измерения проводились при гелиевых температурах в криостате со сверхпроводящим соленоидом.

В рассматриваемой системе с затвором в форме полосы спектр «проксимити» плазменных возбуждений с волновым вектором, направленным вдоль полосы, имеет следующий вид [7]:

$$\omega_{\text{prox}}(q) = \sqrt{\frac{2n_s e^2 h}{\varepsilon\varepsilon_0 m^* W}} q \quad (3)$$

с одной стороны, несущий черты неэкранированного плазмона, с другой, плазмона в полностью экранированной ДЭС. В силу особенностей осесимметричной системы, в случае затвора в форме диска спектр «проксимити» плазмона отличается только численным коэффициентом от аналогичной зависимости для экранированного плазмона, также имея линейный вид [8]:

$$\omega_{m,n}(q) = \Omega_{m,n} \sqrt{\frac{n_s e^2 h}{\varepsilon\varepsilon_0 m^*}} \frac{2}{d}, \quad (4)$$

где d - диаметр затвора, а $\Omega_{m,n}$ - численные коэффициенты, отвечающие числу узлов осцилляций зарядовой плотности в азимутальном и радиальном направлениях. Стоит отметить, что в случае электрического соединения затвора и ДЭС также наблюдается особая «заряженная» мода, соответствующая индексам (0,0).

На рис. 1 представлены соответствующие магнитодисперсионные зависимости, а также (на нижних вставках) дисперсия «проксимити» плазмонов для указанных геометрий. На некоторых образцах удалось пронаблюдать сразу несколько гармоник «проксимити» плазмонов. Экспериментальные точки с хорошей точностью совпали с разработанной теорией [6-8].

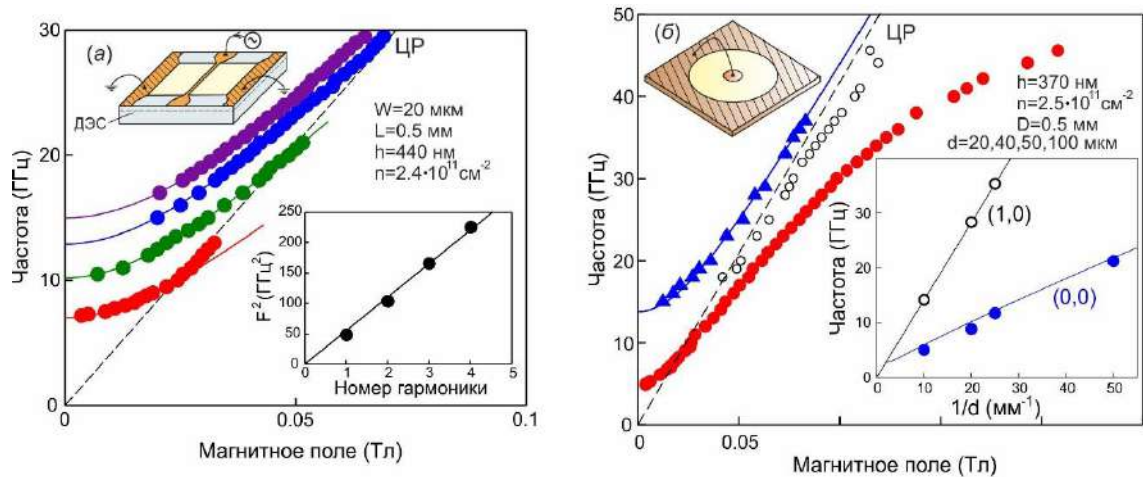


Рис. 1. Магнитодисперсионные зависимости для частично экранированных ДЭС с затвором в форме полоски (а) и диска (б). На верхних вставках показаны схематические изображения образцов. На нижних вставках – дисперсионные зависимости соответствующих «проксимити» плазменных возбуждений.

Литература

1. Stern F. Polarizability of a two-dimensional electron gas // Phys. Rev. Lett. 1967. V. 18, 546.
2. Fetter A.L. Magnetoplasmons in a two-dimensional electron fluid: Disk geometry // Phys. Rev. B. 1986. V. 33, 5221.
3. Muravev V.M., Gusikhin P.A., Zarezin A.M., Andreev I.V., Gubarev S.I., and Kukushkin I.V. Two-dimensional plasmon induced by metal proximity // Phys. Rev. B. 2019. V. 99, 241406(R).
4. Зарезин А.М., Гусихин П.А., Муравьев В.М., Кукушкин И.В. Измерение спектра двумерных «прокси» плазмонов методом стоячих волн // Письма в ЖЭТФ. 2020. Том 111, с. 316-320.
5. Muravev V.M., Zarezin A.M., Gusikhin P.A., Shupletsov A.V., and Kukushkin I.V. Proximity plasma excitations in disk and ring geometries // Phys. Rev. B. 2019. V. 100, 205405.
6. Muravev V.M., Gusikhin P.A., Zarezin A.M., Zabolotnykh A.A., Volkov V.A., and Kukushkin I.V. Physical origin of relativistic plasmons in a two-dimensional electron system // Phys. Rev. B. 2020. V. 102, 081301(R).
7. Zabolotnykh A.A. and Volkov V.A. Interaction of gated and ungated plasmons in two-dimensional electron systems // Phys. Rev. B. 2019. V. 99, 165304.
8. Zabolotnykh A.A. and Volkov V.A. Plasmons in Infinite 2D Electron System Screened by the Disk-Shaped Metallic Gate // Semiconductors. 2019. V. 53, pp. 1870-1872.

УДК 538.9

Прогнозирование образования конкурирующих фаз при росте тонких плёнок $(\text{Mn}_{1-x}\text{Cr}_x)_2\text{GaS}$ на $\text{MgO}(111)$ с использованием модели эффективной теплоты образования и метода решёток совпадающих узлов

З. Назарова^{1,2}, А. Назаров^{1,2}, И. Тарасов¹

¹Институт физики им. Киренского, Федеральный исследовательский центр КНЦ СО РАН

²Сибирский Федеральный Университет

Получение требуемых свойств МАХ-фаз зависит от технологических условий синтеза материала. Это требует тщательного теоретического моделирования взаимодействия элементов на границе раздела. Одновременный рост конкурирующих фаз наряду с МАХ-фазой может происходить из-за выгоды образования конкурирующих фаз, а также из-за более низкоэнергетического интерфейса с подложкой по сравнению с МАХ-фазой. В данной работе мы изучаем термодинамическую выгоду конкурирующих фаз и МАХ-фаз Cr_2GaC и Mn_2GaC в зависимости от химического состава потока атомов. Для изучения этих соединений необходимо рассмотреть системы Cr-Ga-C и Mn-Ga-C . Задача состоит в переборе всех возможных реакций между чистыми элементами, имеющимися в количествах, соответствующих заданной стехиометрии МАХ-фазы, т. е. $\text{Cr:Ga:C}=2:1:1$, что связано с технологической реализацией синтеза. Кроме того, считается, что плотностью совпадающих узлов [3,4] для границ раздела между МАХ-фазами, термодинамически выгодными конкурирующими фазами и поверхностью $\text{MgO}(111)$ показывает роль интерфейса при определении структурного качества тонкой плёнки МАХ-фазы, выращенной на $\text{MgO}(111)$.

В этой работе мы изучаем МАХ-фазу Cr_2GaC . Для изучения этого соединения необходимо рассмотреть систему Cr-Ga-C . Задача состоит в том, чтобы рассмотреть все возможные реакции между чистыми элементами, доступными в различных количествах. Ниже приведён пример реакции.



В этом примере чистые элементы доступны в количествах, соответствующих стехиометрии МАХ-фазы, т. е. $\text{Cr:Ga:C}=2:1:1$. в правой части уравнения коэффициенты при остатках чистых элементов обозначены греческими буквами. Конкурирующей фазой может быть любая из семи возможных фаз в системе Cr-Ga-C : CrGa_4 , Cr_5Ga_6 , CrGa , Cr_3Ga , Cr_3C_2 , Cr_7C_3 , Cr_{23}C_6 .

Энтальпия одной конкретной реакции вычислялась не только в случае наличия элементов в количествах, соответствующих стехиометрии МАХ-фазы, т. е. $\text{Cr:Ga:C}=2:1:1$, но и для всех возможных соотношений.

В данной работе было рассмотрено три различных типа реакций. Типы определяются количеством различных конкурирующих фаз. Первый тип содержит $C_7^1 = 7$ различных реакций, отличающихся конкурирующей фазой; второй тип содержит $C_7^2 = 21$ различных реакцию, каждая из которых содержит уникальную пару конкурирующих фаз; третий тип содержит $C_7^3 = 35$ различных реакций, каждая из которых содержит уникальную тройку конкурирующих фаз. Кроме того, каждая реакция может быть записана без МАХ-фазы в правой части уравнения.

Посредством написания специального кода в программном пакете “Matlab”, были рассчитаны энтальпии всех возможных реакций. Результаты для каждого типа реакций представляются в виде набора из трёх тернарных диаграмм для каждого из случаев (с МАХ-фазой и без МАХ-фазы). Ниже будут приведены результаты только для первого и второго типов реакций при наличии МАХ-фазы в правой части уравнения (рисунки 1, 2).

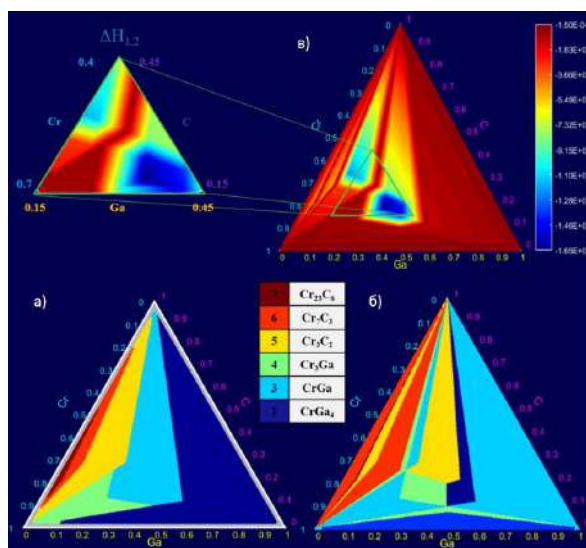


Рис.1. Диаграммы номеров наиболее выгодных конкурирующих фаз (в случае образования МАХ-фазы и одной конкурирующей фазы); (а) первый кандидат; (б) второй кандидат; на диаграмме (в)

показана разница между эффективными теплотами образования (кДж/моль*атом) двух первых наиболее термодинамически выгодных конкурирующих фаз.

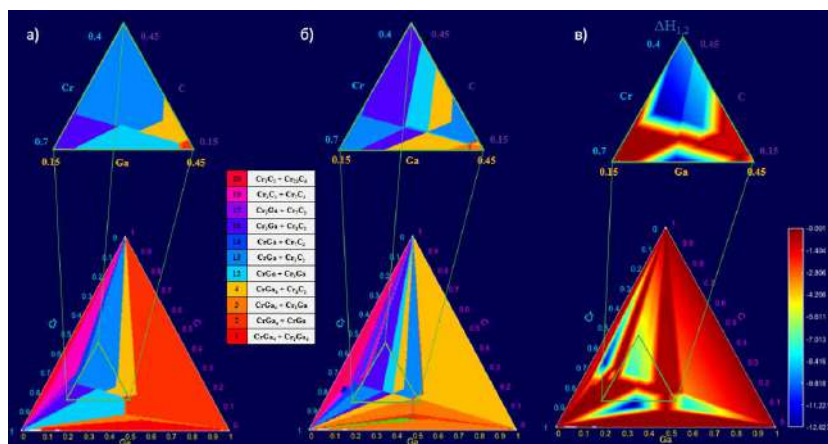


Рис.2. Диаграммы номеров наиболее выгодных конкурирующих фаз (в случае образования МАХ-фазы и двух конкурирующих фаз); (а) первый кандидат; (б) второй кандидат; на диаграмме (в) показана разница между эффективными теплотами образования (кДж/моль*атом) двух первых наиболее термодинамически выгодных конкурирующих фаз.

Каждая точка на тернарных диаграммах рисунка 1 соответствует одному определённому соотношению Cr:Ga:C. Для этого соотношения были рассчитаны и сопоставлены 7 энтальпий. Затем определялось наиболее отрицательное значение, и точка окрашивалась в цвет, соответствующий конкурирующей фазе, образование которой приводит к наибольшему высвобождению энергии. На диаграммах легко наблюдаются области и их границы. Это позволяет нам судить, например, об экспериментальной ошибке в соотношении количеств элементов: сравнивая ожидаемые и полученные конкурирующие фазы, можно определить, какой элемент был взят в избытке. На третьей диаграмме (рисунок 1в) показана разница между теплотами образования двух наиболее термодинамически выгодных конкурирующих фаз. Примечательно, что лидирующие фазы одинаковы, они только меняют свои области.

То же самое было сделано в случае двух конкурирующих фаз (рисунок 2), т. е. для второго типа реакций. Видно, что группа лидирующих фаз снова остаётся прежней: CrGa, Cr₃Ga, Cr₃C₂, в этом случае мы просто имеем дело с их комбинациями.

При формировании магнитных тонких плёнок МАХ-фаз существуют только три термодинамически наиболее выгодные фазы: CrGa, Cr₃Ga, Cr₃C₂.

Хотя реакция образования CrGa имеет наиболее отрицательную энтальпию, Cr₃Ga, из-за малого числа атомов в его ячейке, с большей вероятностью образуется в соответствии с методом решёток совпадающих узлов, что экспериментально доказано [1].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Правительства Российской Федерации в рамках гранта по созданию лабораторий мирового уровня (Соглашение № 075-15-2019-1886).

Литература

1. Petruhins, A., Ingason, A. S., Dahlqvist, M., Mockute, A., Junaid, M., Birch, J., ... & Rosen, J. (2013). Phase stability of Cr_n+ 1Ga_n MAX phases from first principles and Cr₂GaC thin-film synthesis using magnetron sputtering from elemental targets. *physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters*, 7(11), 971-974.
2. Pretorius, R., Theron, C. C., Vantomme, A., & Mayer, J. W. (1999). Compound phase formation in thin film structures. *Critical reviews in solid state and materials sciences*, 24(1), 1-62.
3. Tarasov I.A., Visotin M.A., Kuznetzova T.V., et. al. (2018) J Mater Sci 53:7571–7594. doi: 10.1007/s10853-018-2105-y
4. Visotin M.A., Tarasov I.A., Fedorov A.S., et al (2020) Acta Crystallogr Sect B Struct Sci Cryst Eng Mater 76:469–482. doi: 10.1107/S2052520620005727

Просвечивающая электронная микроскопия продукта, полученного электродуговым методом в системе с молибденом, углеродом и азотом

Ю.З. Васильева, П.Н. Кононенко, А.Я. Пак

Томский политехнический университет

Водородная энергетика является одной из важных областей исследований во всем мире, поскольку водород рассматривается, как устойчивый экологически чистый возобновляемый источник энергии. К относительно простым и экологически безопасным способам получения водорода относят электролиз, в котором происходит расщепление воды в присутствии катализатора [1]. В реакции выделения водорода платина является наиболее активным и каталитически стабильным катализатором, однако небольшие запасы и высокая стоимость ограничивают ее применение [2]. Поэтому поиск альтернативных катализаторов на основе элементов переходных металлов особенно важен для развития водородной энергетике. В этой связи одним из потенциальных катализаторов рассматриваются материалы системы молибден, углерод, азот, благодаря их электронным свойствам и уникальной поверхности [3]. Существует множество способов получения подобных материалов, в том числе и электродуговые [4].

В данной работе представлены результаты просвечивающей электронной микроскопии продукта, полученного в системе с молибденом, углеродом и азотом безвакуумным электродуговым методом в открытой воздушной среде.

Экспериментальные исследования проводились на авторском электродуговом стенде, при этом в качестве рабочей среды использовался воздух нормального давления. Исходная смесь состояла из порошков графита, молибдена и меламина, которая помещалась на дно катода, выполненного в виде тигля. Электродуговой разряд осуществлялся кратким соприкосновением электродов, продолжительность процесса составляла 10 секунд. Полученный продукт измельчался в ступке и анализировался различными методами.

Согласно результатам рентгенофазового анализа (РФА), в синтезированном продукте содержатся две фазы карбида молибдена – орторомбическая модификация Mo_2C и гексагональная модификация $\text{Mo}_{1.2}\text{C}_{0.8}$. Более подробный качественный и количественный РФА представлен в работе [5].

Просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ) продукта была проведена с использованием микроскопа марки Теспаі G2 F20 S-TWIN. Анализ полученных данных показывает, что продукт представляет собой пористую углеродную матрицу, допированную азотом, в которую погружены частицы молибдена и карбидов молибдена (рис. 1а). При этом средний размер погруженных частиц находится в пределах 4-6 нм (рис. 1б). Согласно литературным данным [2,3], такая структура способствует применению продукта в качестве катализатора.

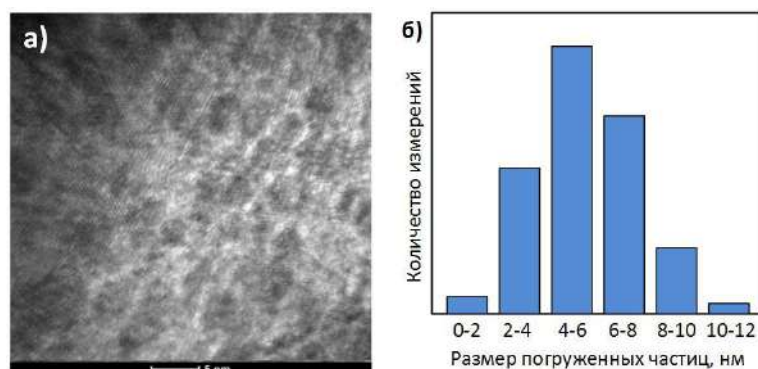


Рис. 1. ПЭМ-снимок продукта (а) и распределение погруженных частиц по размерам (б)

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-38-90088.

Литература

1. Wang R., et al. Hierarchical molybdenum carbide/N-doped carbon as efficient electrocatalyst for hydrogen evolution reaction in alkaline solution // International journal of hydrogen energy. 2018. V. 43. P. 17244.

2. Mu Y., et al. Controllable synthesis of molybdenum carbide nanoparticles embedded in porous graphitized carbon matrixes as efficient electrocatalyst for hydrogen evolution reaction // *Electrochimica Acta*. 2016. V. 215. P. 257-365.
3. Ma Yu., et al. Molybdenum carbide as alternative catalyst for hydrogen production // *IEEE Trans. Plasma Sci.* 2008. V. 36. P. 1765. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2017. V. 75. P. 1101.
4. Yosida Y., et al. Superconductivity in a high-temperature cubic phase of MoC_x encapsulated in the multiwall carbon nanocages // *Physica C*. 2006. V. 442. P. 97-100.
5. Васильева Ю.З., Кононенко П.Н., Пак А.Я. Плазмохимический электроразрядный синтез карбида молибдена // *Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XXI Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых (21-24 Сентября 2020)*. С. 50-53.

УДК 548.4

Расчет смещения на атом при облучении материала на основе NdAlO₃ со структурой перовскита

А.М. Герасимчук, А.О. Семенов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Радиационные дефекты – дефекты кристаллической структуры, образующиеся при их облучении потоками частиц или квантов электромагнитного излучения. Энергия, переданная твёрдому телу (мишени), может привести к разрыву межатомных связей и смещению атомов с образованием первичного радиационного дефекта типа Френкелевской пары (вакансия и межузельный атом) [1].

Цель работы заключалась в расчете смещения на атом (СНА) в матричном материале на основе NdAlO₃ со структурой перовскита, предназначенного для иммобилизации радиоактивных отходов. Рассчитываемая величина позволяет оценивать действия потоков ионизирующего облучения, в результате непрекращающихся радиоактивных распадов, на материал.

Для определения смещений произведенных частицами использовалась программа TRIM. Это комплексная программа, использующая метод Монте – Карло для вычисления взаимодействия ионов и нейтронов с мишенью, и позволяющая рассматривать сложные соединения из композиционных материалов.

На рисунке 1 и 2 можно наблюдать взаимодействие альфа – частицы с энергией 5,5 МэВ (усредненная энергия при распадах актиноидов) и ксенона с энергией 65МэВ (средняя энергия осколка деления трансурановых) соответственно.

Далее производился расчет смещений на атом согласно формуле[1]:

$$R_d = N\sigma_s \left(\frac{\gamma E_i}{4E_d} \right) \Phi \quad (1)$$

где E_i – средняя энергия частицы;

Φ – полный поток частиц;

$\left(\frac{\gamma E_i}{4E_d} \right)$ – число смещений (пар Франкеля), произведённых одной частицей.

Величина смещения на атом при облучении матричного материала потоком альфа – частиц составила $1,094 \times 10^{10} \frac{\text{сна}}{\text{с} \times \text{см}^3}$, для ксенона – $3,72 \times 10^{12} \frac{\text{сна}}{\text{с} \times \text{см}^3}$. На основе полученных результатов в дальнейшем будет проводиться оценка эффективности исследуемого химического соединения неодим в качестве матричного материала.

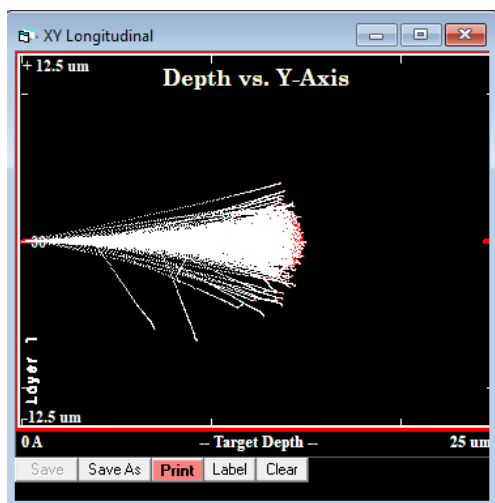


Рис.1. Траектория пробега-частиц с энергией 5,5 МэВ, полученного в модели по программе TRIM.

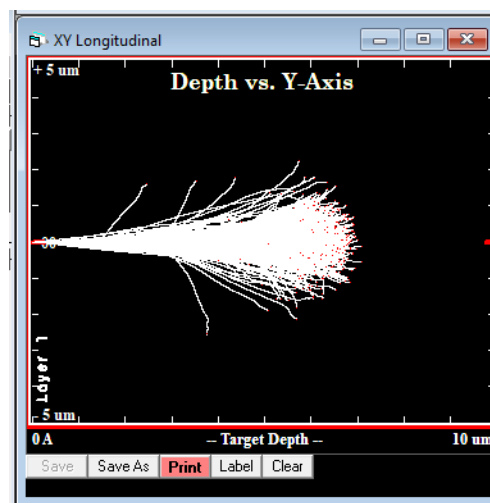


Рис.3. Траектория пробега иона криптона с энергией 65 МэВ, полученного в модели по программе TRIM.

Литература

1. Бондаренко Г. Г., Радиационная физика, структура и прочность твердых тел : [учебное пособие] / Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2016. — 462 с.

УКД 538.915

Резонансная фотолюминесценция двумерной электронной системы в условиях формирования объемного состояния дробного квантового эффекта холла $\frac{1}{3}$

Е.И. Белозеров^{1,2}, А.С. Журавлев¹

¹Институт физики твердого тела РАН

²Высшая школа экономики (национальный исследовательский университет)

Одним из подтвержденных экспериментальных методов изучения объемных электронных состояний в режиме дробного квантового эффекта Холла (ДКЭХ) является резонансное отражение [1]. Именно в сигнале резонансного отражения впервые была обнаружена линия, связанная с состоянием ДКЭХ $1/3$, отделенная спектрально от разрешенных одночастичных оптических переходов двумерной электронной системы (2DES) [2]. Однако этот метод в силу своей сложности не подходит для рутинных измерений 2DES в режиме ДКЭХ; использование же нерезонансного отражения невозможно в силу неконтролируемого фотоиндуцированного вклада в конечный результат измерений. Причина некорректности использования нерезонансной фотолюминесценции (PL) состоит в том, что при возбуждении вклад в регистрируемый сигнал дают не только двухчастичные возбужденные состояния 2DES, для которых выполняются условия «скрытой симметрии», но и трехчастичные состояния, для которых никаких симметричных ограничений на спектральные характеристики сигнала нет [3]. В работе впервые применена методика резонансной фотолюминесценции (RPL) для исследования состояния ДКЭХ $1/3$, что позволило избавиться от нежелательной фотолюминесценции трехчастичных комплексов. Показано, что в этом случае нарушения «скрытой симметрии» не наблюдается, однако амплитуда сигнала RPL в условиях формирования объемного состояния ДКЭХ $1/3$ изменяется настолько сильно, что это изменение может служить индикатором этого дробного состояния.

Была использована гетероструктура с одиночной квантовой ямой GaAs/AlGaAs шириной 19 нм, с концентрацией электронов в двумерном канале $0,84 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и подвижностью более $3,5 \cdot 10^7 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$. Гетероструктура помещалась в откачиваемый резервуар с жидким ^3He , который, в свою очередь, помещался в криостат со сверхпроводящим соленоидом. Оптические измерения проводились в диапазоне температур 0.45-4.2 К и в диапазоне магнитных полей 0-14 Тл с использованием двухсветовой методики. Один световод служил для резонансного и нерезонансного возбуждения 2DES, а второй - для сбора сигнала PL и RPL от образца и передачи сигнала на входную

щель решеточного спектрометра, оборудованного охлаждаемой ПЗС камерой. Для резонансной накачки использовался полупроводниковый перестраиваемый узкополосный лазер «Тортиса», а для нерезонансной — широкополосный диод с длиной волны фотовозбуждения 780 нм.

При температуре бани 1.6-К принципиальной разницы в спектрах PL и RPL не наблюдается. Спектр состоит из двух основных линий, соответствующих оптическим переходам с нулевого уровня Ландау зоны проводимости на нулевой уровень Ландау первой размерно-квантованной зоны тяжелых дырок валентной зоны квантовой ямы ($hh^1_0 - e_0$), а также слабой линии, связанной с переходом на нижайший по энергии спиновый подуровень подзоны легких дырок ($lh^1_0 - e_0$) (рис. 1). Уменьшение температуры бани до 0.5 К приводит к появлению трех дополнительных особенностей в спектрах PL непосредственно в области формирования ДКЭХ 1/3 (10.4-Т). Новые линии не связаны с какими-либо одночастичными оптическими переходами в 2DES (рис. 1). Аналогичное уменьшение температуры в области больших магнитных полей, где состояние 1/3 уже не наблюдается, приводит к появлению шести новых спектральных особенностей, что делает интерпретацию спектров PL затруднительной (рис. 1).

Основным экспериментальным результатом представленной работы является пороговое изменение интенсивностей линий RPL в условиях формирования ДКЭХ 1/3 при понижении температуры гелиевой бани (рис. 2). Если при температуре 1.6 К интенсивности линий переходов с нулевого уровня Ландау отражают заселенность электронных и дырочных уровней. Учитывая, что практически все равновесные электроны при 0.5 К находятся на нижайшем уровне Ландау, получается парадоксальный результат: концентрация электронов на верхнем спиновом подуровне Ландау много меньше, чем на нижнем, сила осциллятора оптических переходов с нижнего спинового подуровня выше, чем с верхнего, а амплитуда RPL с верхнего спинового подуровня на порядок величины превышает амплитуду RPL с нижнего спинового подуровня. Наблюдаемый эффект имеет универсальный характер; т. е. не зависит от энергии используемого резонанса для фотовозбуждения RPL.

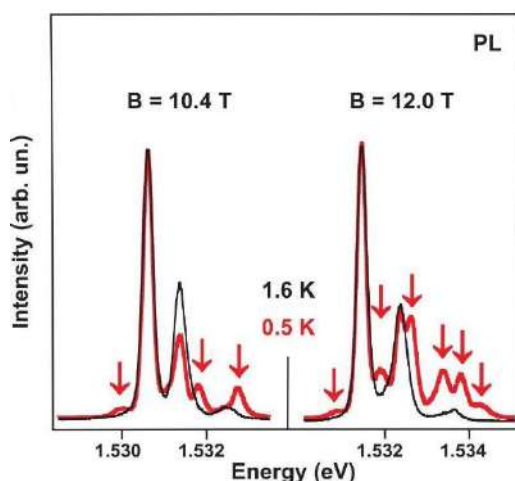


Рис. 1. Спектры нерезонансной фотолуминесценции 2DES, измеренные в двух магнитных полях при двух температурах 0,5 К (красные сплошные линии) и 1,6 К (чёрные сплошные линии).

Стрелками указаны оптические переходы, не соответствующие каким-либо разрешённым двухчастичным оптическим переходам в 2DES.

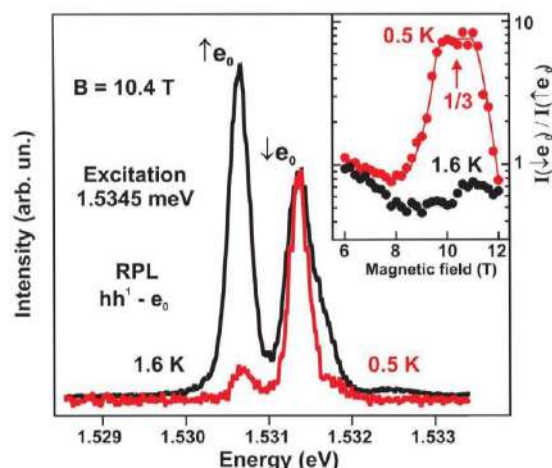


Рис. 2. Спектры резонансной фотолюминесценции (RPL) в области формирования ДКЭХ 1/3 при двух температурах 0,5 К (красные сплошные линии) и 1,6 К (черные сплошные линии), измеренные при резонансном возбуждении оптического перехода из размерно-квантованной подзоны легких дырок. На вставке в логарифмическом масштабе показаны зависимости отношений амплитуд линий RPL для перехода с верхнего и нижнего спиновых подуровней нулевого уровня Ландау электронов от магнитного поля, измеренные при температурах 0,5 К (красные сплошные точки) и 1,6 К (черные сплошные точки)

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант #20-02-00230

Литература

1. L.V. Kulik, A.S. Zhuravlev, S. Dickmann, A.V. Gorbunov, V.B. Timofeev, I.V. Kukushkin, and S. Schmult, Nature Comm. 7, Article number: 13499(2016).
2. Л.В. Кулик, А.С. Журавлев, В.Е. Бисти, В.Е. Кирпичев, М.Н. Ханнанов, И.В. Кукушкин, Письма в ЖЭТФ 100, 659 (2014).
3. A. S. Zhuravlev, V. A. Kuznetsov, L. V. Kulik, V. E. Bisti, V. E. Kirpichev, I. V. Kukushkin, and S. Schmult, Phys. Rev. Lett. 117, 196802 (2016).

УДК 548.3

Синтез, уточнение кристаллической структуры и мёссбауэровские исследования монокристаллов $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{VO}_3$

**Н.И. Снегирёв¹, Е.С. Смирнова¹, И.С. Любутин¹, С.С. Старчиков¹, В.В. Артемов¹,
М.В. Любутина¹, С.В. Ягунов², М.Б. Стругацкий²,
Ю.А. Могилевец², К.А. Селезнева², О.А. Алексеева¹**

¹Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

²Физико-технический институт, ФГАОУ ВО «КФУ им. В.И. Вернадского»

Тригональные кристаллы бората железа FeVO_3 обладают уникальным набором магнитных, оптических, акустических и резонансных свойств [1]. Диамагнитное разбавление подрешетки железа ионами галлия позволяет синтезировать кристаллы с заданными свойствами [2,3]. В частности, изменение концентрации диамагнитной примеси Ga в кристаллах железо-галлиевых боратов $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{VO}_3$ позволяет управляемо понижать температуру магнитного перехода, что может вести к улучшению параметров работы таких кристаллов при их использовании в качестве монохроматоров в синхротронных экспериментах на основе ядерных резонансов [4].

Целью настоящей работы было синтезировать серию монокристаллов железо-галлиевых боратов и исследовать их методами рентгеноструктурного анализа и мёссбауэровской спектроскопии.

Кристаллы $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{VO}_3$ с $0 \leq x \leq 1$ были выращены в системе $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3\text{--PbO--PbF}_2\text{--B}_2\text{O}_3$ по раствор-расплавной методике, развитой в работах [1,2]. На Рис. 1 приведен температурный режим для синтеза монокристаллов $\text{Fe}_{0.95}\text{Ga}_{0.05}\text{VO}_3$. Он состоит из следующих этапов: нагрев (а); циклы с

резким понижением температуры для гомогенизации раствора-расплава (b); медленное охлаждение (c), во время которого происходит рост кристаллов; охлаждение (d).

Синтезированные кристаллы имели вид тонких базисных пластин (см. Рис. 1).

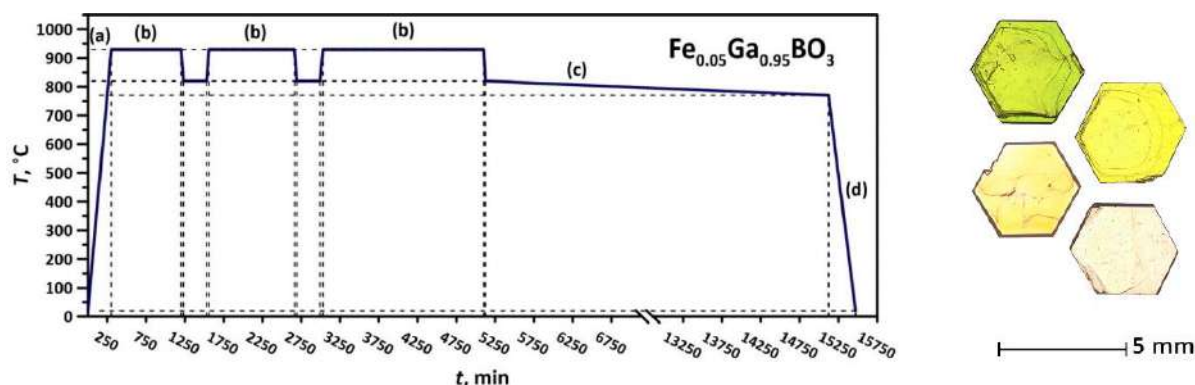


Рис. 1. Температурный режим кристаллизации для состава $\text{Fe}_{0.95}\text{Ga}_{0.05}\text{BO}_3$ (слева), синтезированные кристаллы $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$ с различным x (справа).

Показано, что атомная структура монокристаллов $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$ описывается пространственной группой симметрии $R\bar{3}c$, $Z=6$. Установлено, что с увеличением концентрации Ga параметры элементарной ячейки уменьшаются от $a = 4.622(1) \text{ \AA}$, $c = 14.473(6) \text{ \AA}$ в исходном FeBO_3 до $a = 4.565(1) \text{ \AA}$, $c = 14.179(6) \text{ \AA}$ в GaBO_3 . Это коррелирует с величинами ионных радиусов Fe^{3+} и Ga^{3+} ($0.645 \text{ \AA}$ и $0.62 \text{ \AA}$).

Плотность кристаллов, определенная на основе рентгенодифракционных данных, составляет от 4.266 г/см^3 до 5.004 г/см^3 для FeBO_3 и GaBO_3 , соответственно. Атомы Fe и Ga занимают смешанную позицию $6b$. Расстояние (Fe,Ga) – O уменьшается с ростом концентрации Ga от $2.026(1) \text{ \AA}$ для FeBO_3 до $1.988(1) \text{ \AA}$ для GaBO_3 . Расстояние B – O не зависит от концентрации Ga и для всех образцов составляет $1.378(1) \text{ \AA}$.

Как видно из Рис. 2, характер распределения электронной плотности одинаков для кристаллов с различным x . Существенного разупорядочения не наблюдается как вблизи смешанной позиции (Fe, Ga), так и вблизи позиции атомов кислорода. Химические связи (Fe,Ga) – O являются слабыми, B – O – более сильными.

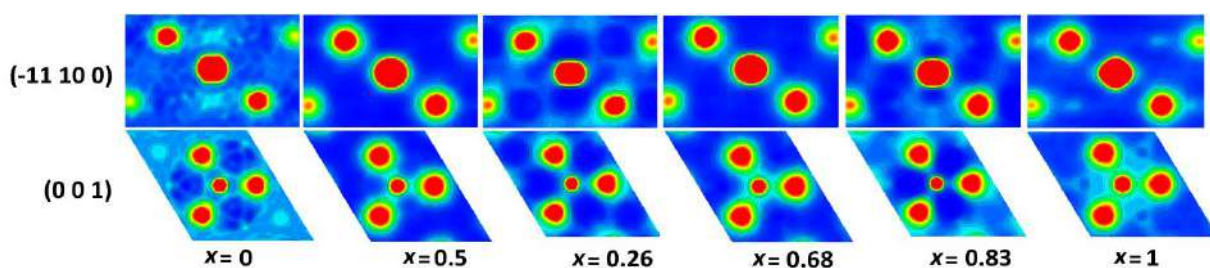


Рис. 2. Карты распределения электронной плотности для кристаллов $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$ с различным x . Сечение $(-11 10 0)$ проходит через атом (Fe, Ga) (в центре) и два атома O (по краям). Сечение $(0 0 1)$ проходит через треугольники BO_3 (атом бора в центре, а три атома кислорода вокруг). Красный цвет соответствует максимальной электронной плотности, синий – минимальной.

Мёссбауэровские спектры были получены в геометрии на поглощение при комнатной температуре. Базисные плоскости кристаллов при измерениях были ориентированы перпендикулярно вектору распространения γ -квантов.

Спектры кристаллов с $x = 0$ и 0.05 представляли собой шестерку линий, что свидетельствует о магнитном упорядочении ионов железа в таких образцах. Рассчитанные значения изомерных сдвигов для этих образцов составили, соответственно, $\delta = 0.392(9)$ и $0.39(1) \text{ мм/с}$, что указывает на высокоспиновое состояние ионов Fe^{3+} ($3d^5$, $S = 5/2$). Квадрупольные сдвиги для $x = 0$ и 0.05 были одинаковы в пределах погрешности: $\varepsilon = -0.188(1)$ и $-0.18(1) \text{ мм/с}$. Это означает, что окружение ядер железа существенно не изменяется. Однако магнитные сверхтонкие поля на ядрах железа H_{hf} заметно уменьшаются с $337.8(9)$ до $325.4(2) \text{ кЭ}$ для кристаллов $x = 0$ и 0.05 , соответственно. Это можно объяснить тем, что замещение части ионов Fe^{3+} диамагнитными ионами Ga^{3+} в структуре FeBO_3

приводит к ослаблению взаимодействия между ионами железа. Спектры образцов с $x = 0.26, 0.68$ и 0.83 описываются дублетными линиями, что указывает на парамагнитное состояние ионов железа в этих кристаллах при комнатной температуре. Значения изомерного сдвига δ и квадрупольного расщепления Δ возрастают от $\delta = 0,375(4)$ мм/с и $\Delta = 0,419(4)$ мм/с для $x = 0.26$ до $\delta = 0.384(2)$ мм/с и $\Delta = 0.46(1)$ мм/с для $x = 0.83$.

Таким образом, в работе получены важные сведения о влиянии диамагнитного разбавления на кристаллическую структуру, электронные свойства и магнитное состояние синтезированных монокристаллов $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$. Эти результаты будут полезны при использовании железо-галлиевых боратов в ядерно-резонансных синхротронных экспериментах.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-29-12016-мк, в части синтеза кристаллических образцов и мёссбауэровских исследований.

Структурный анализ проведен при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» с использованием оборудования ЦКП (проект RFMEFI62119X0035).

Литература

1. Yagupov S., Strugatsky M., Seleznyova K. et. al. // Crystal Growth & Design. 2018. V.18. P.7435
2. Yagupov S., Strugatsky M., Seleznyova K. et. al. // Applied Physics A. 2015.V.121. P.179
3. Seleznyova K., Strugatsky M., Yagupov S. et. al. // Journal of Applied Physics. 2019. V.125, P.223905
4. Potapkin V., Chumakov A., Smirnov G. et al. // Journal of Synchrotron Radiation 2012. V.19. P.559.

УДК 53.092

Скорость деформации во фронте ударной волны в полимеризованной эпоксидной смоле

Т.А. Ростилев, В.С. Зиборов

Объединённый институт высоких температур РАН

Эпоксидные смолы являются связующим материалом для различных видов современных композитных материалов, в том числе и тех, которые в ходе своей эксплуатации могут подвергаться ударным нагрузкам [1]. В связи с этим изучение аспектов распространения ударных волн и динамики перехода из невозмущенного в ударно-сжатое состояние в отдельном компоненте таких композитных материалов является актуальной задачей.

В работе были экспериментально исследованы ударно-волновые свойства модифицированной эпоксидной смолы Этал-370, отвержденной при комнатной температуре отвердителем Этал-45М ($\rho_0 = 1.15 \pm 0.01$ г/см³), в диапазоне напряжений 0.92-2.70 ГПа. Ударное нагружение происходило в результате одноосного плоскопараллельного соударения ударника из сплава алюминия Д16т с экспериментальной сборкой, содержащей образец эпоксидной смолы. В экспериментах толщины образцов были в диапазоне 4-10 мм.

Измеряемыми величинами являлись: скорость ударника, которая составляла от 337 до 829 м/с, скорость ударной волны в образце и профиль массовой скорости тыльной поверхности образца при выходе на неё ударной волны. Последнее измерение осуществлялось с помощью интерферометра VISAR [2], обладающего временным разрешением порядка 1 нс. Разгрузка происходила вводу, поэтому измеренные профили соответствуют массовой скорости на границе эпоксидная смола – вода. Профили скорости представлены на рис. 1а.

По результатам измерений скоростей ударной волны и ударника по методу отражения [3] была рассчитана ударная адиабата в координатах скорость волны U_s – массовая скорость U_p для диапазона массовых скоростей 0.28-0.66 км/с (рис. 1б). Полученная адиабата описывается линейной зависимостью:

$$U_s = 2.78 + 1.25U_p, \text{ [км/с]} \quad (1)$$

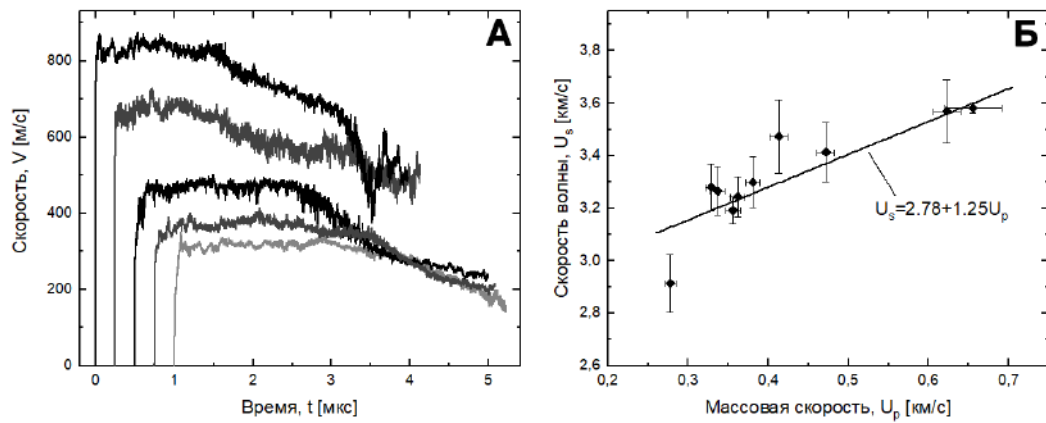


Рис. 1. (а): Профили скорости для эпоксидной смолы в диапазоне напряжений 0.92-2.70 ГПа. (б): Ударная адиабата эпоксидной смолы в координатах скорость волны – массовая скорость.

Профиль скорости позволяет оценить максимальный градиент массовой скорости во фронте ударной волны. Далее эта величина используется для расчета продольной скорости деформации во фронте волны [4]. Известно, что продольная скорость деформации во фронте ударной волны $\dot{\varepsilon}_x$ и напряжение за фронтом σ связаны степенной зависимостью:

$$\dot{\varepsilon}_x = A\sigma^n, \quad (2)$$

где A – константа, уникальная для конкретного материала, а показатель степени n для различных твердых сплошных материалов близок к 4 [5,6]. В настоящей работе этот показатель степени для эпоксидной смолы равен 5.8 (рис. 2а). Подобное отклонение может быть связано с не достижением в экспериментах ударной волной устойчивого состояния [6] при слабых режимах нагружения и малых толщинах образцов. Устойчивое состояние ударной волны характеризуется постоянством скорости каждого участка её фронта во время распространения по веществу и является необходимым условием для корректного анализа зависимости (2). С другой стороны, такой результат может быть вызван отличиями в механизмах пластической деформации характерных для полимеров [7] и для металлов, преимущественно для которых и было получено $n \approx 4$.

Ширина фронта ударной волны контролируется его вязкостью. Оценка коэффициента вязкости для эпоксидной смолы производилась по формуле $\eta = \tau / \dot{\varepsilon}_x$, где τ – максимальное напряжение сдвига [4]. С ростом напряжения (рис. 2б) коэффициент вязкости понижается, что, вероятно, связано с разогревом вещества за фронтом ударной волны.

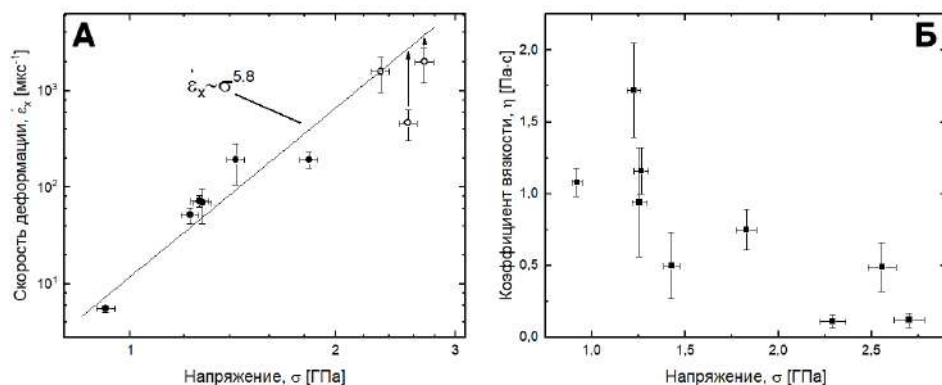


Рис. 2. (а): Зависимость продольной скорости деформации во фронте ударной волны от напряжения за фронтом для эпоксидной смолы. (б) Зависимость коэффициента вязкости от напряжения за фронтом ударной волны для эпоксидной смолы.

Литература

1. Gupta, N., Zeltmann, S.E., Shunmugasamy, V.C. et al. Applications of Polymer Matrix Syntactic Foams // JOM. 2014. V. 66. P. 245.
2. Barker L.M., Hollenbach R.E. Laser interferometer for measuring high velocities of any reflecting surface // J. Appl. Phys. 1972. V. 43. P. 4669.

3. Трунин Р.Ф., Гударенко Л.Ф., Жерноклетов М.В., Симаков Г.В. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2001. 446с.
4. Канель Г.И., Савиных А.С., Гаркушин Г.В., Разоренов С.В. Оценка вязкости глицерина по ширине слабой ударной волны // ТВТ. 2017. Т. 55. №2. С. 380.
5. Swegle J.W., Grady D.E. Shock viscosity and the prediction of shock wave rise times // J. Appl. Phys. 1985. V. 58. P. 692.
6. Grady D.E. Structured shock waves and the fourth-power law // J. Appl. Phys. 2010. V. 107. 013506.
7. Zaretsky E.B., Kanel G.I. Response of poly(methyl methacrylate) to shock-wave loading at elevated temperatures // J. Appl. Phys. 2019. V. 126. 085902.

УДК 538.915

Спиновые магнитоэкситоны в квантово-холловском ферромагнетике при факторе заполнения

Б.Д. Кайсин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Институт физики твердого тела РАН

На структуру основного состояния в сильнокоррелированных двумерных электронных системах (ДЭС) значительное влияние оказывает обменное межчастичное взаимодействие порядка $e^2/\epsilon l_B$. При определенном соотношении между данным энергетическим вкладом и одночастичной щелью над основным состоянием при факторе заполнения $\nu = 2$ система может изменить спиновую структуру своего основного состояния с парамагнитного на энергетически более выгодное ферромагнитное.

Одним из способов добиться условий ферромагнитного перехода является поворот ДЭС относительно магнитного поля. Связано это с тем, что при наклоне изменяется соотношение между Зеемановским расщеплением спиновых подуровней внутри одного уровня Ландау (зависит от полного поля) и циклотронным расщеплением между соседними уровнями Ландау (зависит только от перпендикулярной компоненты поля), вследствие чего уменьшается энергетическая щель над основным состоянием.

Изменение спиновой поляризации основного состояния наблюдалось в серии магнитотранспортных экспериментов как пересечение смежных спиновых подуровней последовательных уровней Ландау [1,2]. В магнитооптических экспериментах удастся извлечь информации об энергетическом спектре системы. В частности, удалось наблюдать диапазоны параметров системы, отвечающие ферромагнитному и парамагнитному упорядочению в окрестности четных факторов заполнения [3].

В настоящей работе будет показано, что формирование фазового перехода является следствием неустойчивости парамагнитной фазы в условиях значительного смягчения нижайшего по энергии спинового коллективного возбуждения. Для этого, методом неупругого рассеяния света, были проведены исследования кулоновских корреляций на нижайших по энергии коллективных возбуждениях – циклотронные спин-флип магнитоэкситоны (CSFM), при парамагнитном факторе заполнения $\nu = 2$. Данные возбуждения представляют собой переход между двумя уровнями Ландау с переворотом спина. Энергии CSFM была измерена как функция концентрации на серии образцов ZnO/MgZnO (Рис. 1). Показано что в диапазоне концентраций, соответствующих параметру взаимодействия $r_s = 5 - 7$, совместный вклад кулоновской и зеемановской энергий приводит к “смягчению” CSFM, которое вызывает спонтанное переключение спиновой конфигурации на факторе заполнения $\nu = 2$ с парамагнитной на ферромагнитную. Также были проведены теоретические оценки корреляционного вклада в энергию CSFM, которые находятся в согласии с экспериментом и проясняют механизм фазового перехода.

В условиях фазового перехода обнаружена аномально сильная по интенсивности спектральная линия антистоксовой компоненты спинового экситона (SE) (Рис. 2). SE представляет собой волну, образованную переходом электронов между двумя спиновыми подуровнями одного уровня Ландау. Данная особенность проявляется в окрестности фактора заполнения $\nu = 2$ при ферромагнитном упорядочении спиновой подсистемы, при этом в условиях парамагнитного упорядочения

она не наблюдается. Показано, что происхождение данной линии может быть вызвано формированием ансамбля долгоживущих коллективных возбуждений в ферромагнитной фазе на факторе заполнения $\nu = 2$.

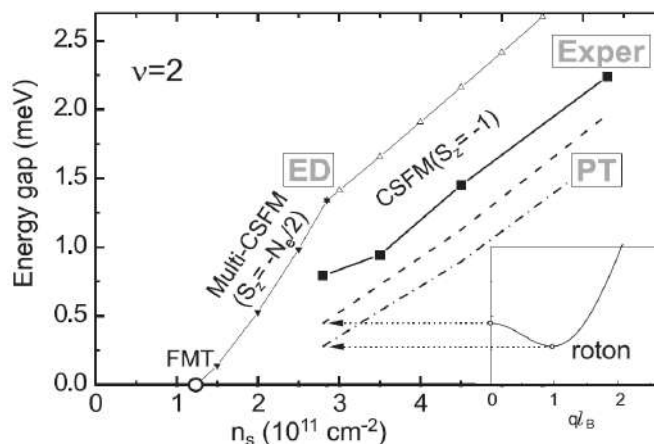


Рис.1. Сопоставление экспериментальных значений энергии CSFM[$S_z=-1$] с результатами расчетов в приближении Хартри-Фока (штриховые линии) и точной диагонализации (сплошная кривая). Наблюдается точка неустойчивости FMT как результат смягчения возбуждения с лавинообразным образованием CSFM.

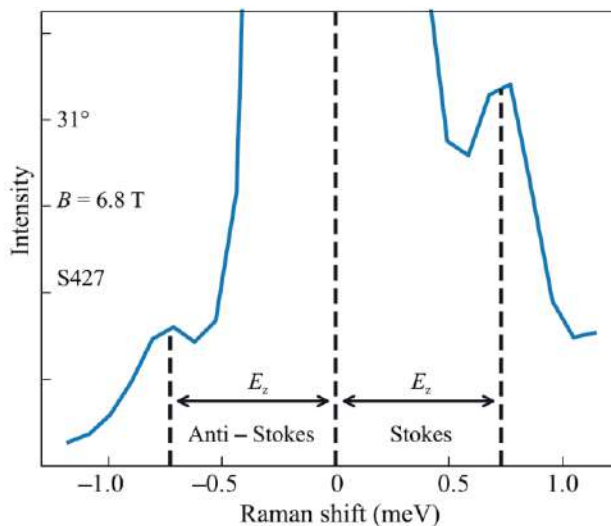


Рис.1. Спектр стоксовой и антистоксовой компоненты SE, полученный при угле наклона который соответствует ферромагнитному упорядочению на факторе заполнения $\nu = 2$.

Литература

1. A. Tsukazaki, M. Kawasaki et.al, Phys.Rev. B 78, 233308 (2008).
2. Y. Kozuka, M. Kawasaki et.al, Phys.Rev.B 85, 075302 (2012).
3. A.B.Vankov, B.D.Kaysin, I.V.Kukushkin, Phys.Rev.B 96, 235401 (2017)

УДК 538.911

Структура и свойства монокристаллов комплексов на основе фталоцианиноподобных молекул с азотсодержащими лигандами

И.А Ромпанен^{1,2}, А.В. Кузьмин², М.А. Фараонов³

¹ Институт физики твердого тела РАН

² Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

³ Институт проблем химической физики РАН

Кристаллы металлоорганических комплексов на основе плоских фталоцианиноподобных молекул и анионов представляют особый интерес как материалы с перспективными физико-химическими свойствами. Например, сам фталоцианин (Pc) имеет сравнительно малый потенциал ионизации и может использоваться как компонент молекулярных или полимерных органических проводников. В центр Pc может координироваться атом металла Me = Co, Fe, Sn и др., при этом общий мотив упаковки металлофталоцианиновых макроциклов, как правило, слабо зависит от типа Me. Модификация Pc путем присоединения к Me различных аксиальных лигандов X = CN, Im, Cl и др. позволяет менять параметры латерального сдвига макроциклов Pc и, тем самым, управлять степенью их π - π взаимодействия и проводящими свойствами кристалла (например TPP(CoPc(CN)₂)₂ [1], $\sigma = 120 \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$). Использование парамагнитных металлических атомов может привести к появлению интересных магнитных Me-Me взаимодействий при сохранении проводимости в Pc подрешетке, как это наблюдалось ранее в кристаллах TPP(FePc(CN)₂)₂ [2].

В данной работе были изучены кристаллическая и молекулярная структура базовых анионов, оптические и магнитные свойства монокристаллов серии новых комплексов с анионами [(N-MeIm)₂Fe^I{T(2,3-Q)Pz}^{•3-}]²⁻, [Sn^{II}L₂Mac]²⁻ (Mac = Pc, Nc; L = CN⁻, OCN⁻, Im⁻), {Sn^{IV}(CN)₂[TPP(CN)³⁻]}⁻, [B^{III}(CN)[SubPc(CN)₂³⁻]]²⁻ и [Ga^{III}(CN)(Pc^{•3-})]⁻. Все монокристаллы получены методом медленной диффузии гексана C₆H₁₂ в маточный раствор, содержащий необходимые компоненты комплекса. Указанный метод позволяет получать высококачественные кристаллы размером около 200 μm , пригодные для низкотемпературного рентгеноструктурного анализа (РСА). Данные рентгендифракционных экспериментов были получены с использованием лабораторного четырехкружного дифрактометра Oxford Gemini R, криогенной приставки от Cryojet и обработаны в кристаллографических программах CrysAlis Pro, SHELX-2018/3 [3] и Olex 2 [4].

По итогам проделанной работы были исследованы молекулярная структура и свойства дианион-радикалов [(N-MeIm)₂Fe^I{T(2,3-Q)Pz}^{•3-}]²⁻. На основе результатов РСА было обнаружено чередование углерод-азотных связей в молекулярном остове Pz – разница между короткими и длинными связями C-N_{meso} составляет 0.017 Å. Показано, что образование аниона сопровождается сильным сдвигом на оптических спектрах комплекса полосы Core (характерной для Pz, Pc, Nc) в сторону больших энергий, а сдвига Q-полосы не наблюдается. По данным магнитометрии, в кристаллах с [(N-MeIm)₂Fe^I{T(2,3-Q)Pz}^{•3-}]²⁻ наблюдаются слабые антиферромагнитные взаимодействия спинов локализованных на Pz и Fe с температурой Вейса –3 К [5].

Были детально изучены структурные особенности кристаллов комплексов серии [Sn^{II}L₂Mac]²⁻ (Mac = Pc, Nc; L = CN⁻, OCN⁻, Im⁻). Экспериментально и теоретически показано, как некомпенсированное электростатическое поле противоионов комплекса оказывает влияние на положение и ориентацию аксиального лиганда L и распределение электронной плотности по Mac [6].

Со структурной точки зрения были рассмотрены процессы присоединения азотсодержащих лигандов к макроциклам в анионных комплексах {Sn^{IV}(CN)₂[TPP(CN)³⁻]}⁻ и [B^{III}(CN)[SubPc(CN)₂³⁻]]²⁻ [7]. Показано, как используемые ранее подходы в синтезе проводящих соединений металлофталоцианинов с аксиальными CN лигандами работают в случаях фталоцианиноподобных макроциклов, таких как порфирины и субфталоцианины. Для монокристаллов каждого из комплексов получены и проанализированы оптические свойства (ИК, УФ диапазоны) (рис. 1). Также были описаны особенности возникновения магнитных свойств для первого соединения.

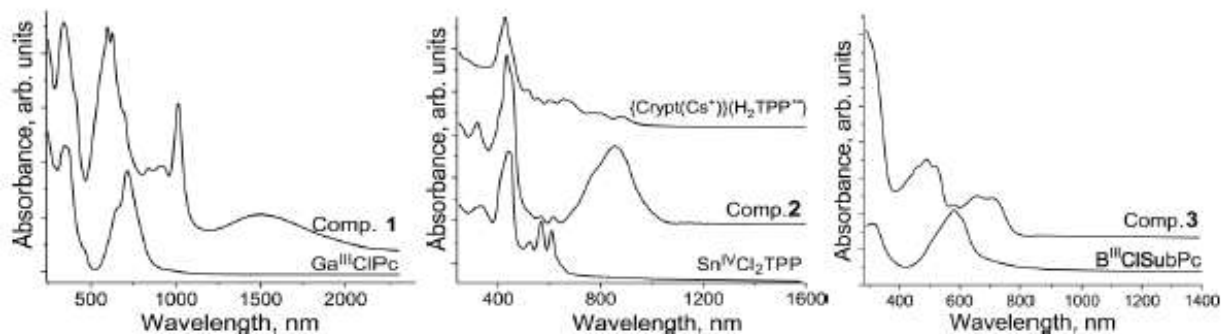


Рис. 1. Спектр полученных соединений, исходные и эталонные соединения в диапазоне ультрафиолетовом-видимом-ближнем инфракрасном.

Результаты проведенных в данной работе рентгеноструктурных исследований существенным образом помогают объяснить и прогнозировать появление практически значимых физико-химически свойств металлоорганических фталоцианиновых комплексов, что, в свою очередь, позволяет разрабатывать функциональные материалы на их основе.

Список сокращений: Pc – фталоцианин, Nc – нафталоцианин, Im – имидазолат, TPP – тетрафенилпорфирин, MeIm – метилимидазол, T – тетра, Q – хиноксалин, Pz – порфиразин, SubPc – субфталоцианин.

Литература

1. Hasegawa H. *et al.* A highly conducting partially oxidized salt of axially substituted phthalocyanine. Structure and physical properties of TPP [Co(Pc)(CN)₂]₂{TPP = tetraphenylphosphonium, [Co(Pc)(CN)₂] = dicyano(phthalocyaninato)cobalt(III)} // *J Mater Chem.* 1998. V. 8, № 7. P. 1567–1570.
2. Matsuda M. *et al.* A one-dimensional macrocyclic π -ligand conductor carrying a magnetic center. Structure and electrical, optical and magnetic properties of TPP[Fe(Pc)(CN)₂]₂{TPP = tetraphenylphosphonium and [Fe(Pc)(CN)₂] = dicyano(phthalocyaninato)iron(III)} // *J Mater Chem.* 2000. V. 10, № 3. P. 631–636.
3. Sheldrick G.M. Crystal structure refinement with SHELXL // *Acta Cryst. Sect. C.* 2015, V. 71. P. 3-8.
4. Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J., Howard J.A.K., Puschmann H. OLEX2: a complete structure solution, refinement and analysis program // *J. Appl. Cryst.* 2009, V. 42. P. 339-341.
5. Faraonov M.A. *et al.* Molecular Structure, Optical and Magnetic Properties of Iron Tetra(2,3-quinioxalino)porphyrine [(N-MeIm)₂FeI{T(2,3-Q)Pz}³⁻]²⁻ Radical Dianions // *Macroheterocycles.* 2019. V. 12, № 2. P. 202–208.
6. Konarev D.V. *et al.* Coordination-induced metal-to-macrocyclic charge transfer and effect of cations on reorientation of the CN ligand in the {SnL₂Mac}²⁻ dianions (L = CN⁻, OCN⁻, Im⁻; Mac = phthalocyanine or naphthalocyanine) // *Dalton T.* 2019. V. 48, № 15. P. 4961–4972.
7. Konarev D.V., Kuzmin A.V., Shestakov A.F., Rompanen I.A., Lyubovskaya R.N. Attachment of cyano anions to phthalocyanine, tetraphenylporphyrin and subphthalocyanine macrocycles: reduction of macrocycles vs formation of cyano-containing macrocyclic anions // (in press).

УДК 538.911

Структурные и оптические свойства иодида холина под давлением

К.А. Гордиенко, Ю.Н. Журавлев

ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет»

В настоящее время стоит задача разработки безопасных, дешевых, а также экологически чистых электрохимических устройств. В качестве основных претендентов на роль электролитов в таких устройствах как конденсаторы [1] и термобатареи [2] выступают ионные кристаллы, к числу которых относятся и галогениды холина. Данные молекулярные кристаллы привлекают к себе внимание, прежде всего, как экологически чистые реакционные среды с низкой стоимостью и хорошей водорастворимостью, что позволяет производить из них высокопроводящие водные растворы.

В данной работе были проведены теоретические исследования структурных и оптических свойств иодида холина (ChI) (рис. 1) при различных давлениях. Расчеты проводились с использованием пакета Crystal [3], основанного на теории функционала плотности. Использовался PBE функционал с дисперсионной поправкой D3 [4], которая позволяет корректно учитывать межмолекулярное взаимодействие.

Молекулярный кристалл C₅H₁₄NO I относится к моноклинной сингонии с пространственной группой P₂₁. Параметры решетки при различных давлениях приведены в (таб. 1).

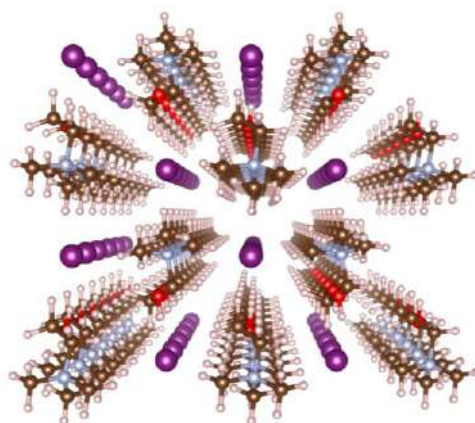


Рис. 1. Кристаллическая структура йодида холина

Давление, [GPa]	a, [Å]	b, [Å]	c, [Å]	Угол β , °
0	5.830	7.981	8.913	92.6
0.5	5.792	7.822	8.817	93.0
1	5.768	7.694	8.729	93.4
1.5	5.750	7.587	8.650	93.7
2.0	5.731	7.496	8.582	94.0

Таб. 1. Параметры решетки $C_5H_{14}NO$ I под давлением

Длины связей, а также параметры решетки, рассчитанные для нулевого давления, находятся в хорошем соответствии с результатами других авторов [5,6]. Уменьшение объема элементарной ячейки от 0 GPa до 2.0 GPa составило 11.21%, что говорит о существенном изменении решетки, однако в самих молекулах йодида холина изменения не столь значительны, это видно по изменению длин связей, к примеру, для связи N-C изменение составило всего 0.33%, для связи C-O - 0.28%, для C-C - 0.06%. Расстояния между молекулами изменились сильнее, в среднем на 6% (между связями O-H). О незначительном изменении в строении молекул также свидетельствует рассчитанный ИК-спектр кристалла, приведенный на (рис. 2).

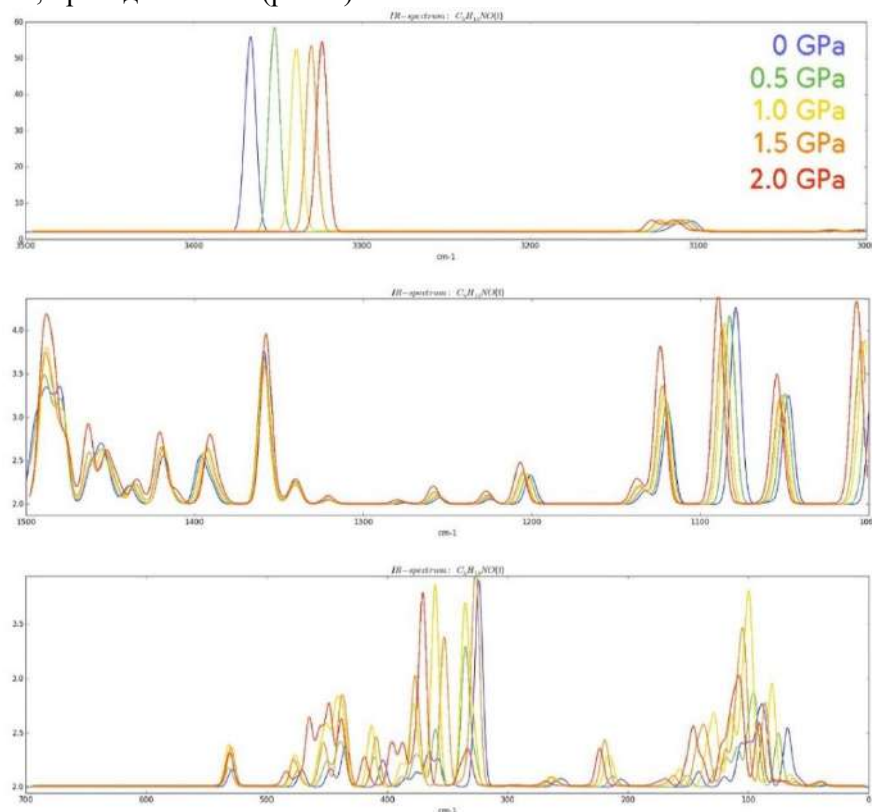


Рис. 2. ИК-спектр кристалла йодида холина при различных давлениях

Как видно из рисунка 2, сильнее всего подверглась изменению высокочастотная часть спектра, отвечающая колебаниям связанной гидроксильной группы О-Н от 3362 до 3321 см⁻¹, что составляет 1,21%. Менее всего изменилась средняя часть спектра, отвечающая внутримолекулярным колебаниям связей С-С (1250-1140 см⁻¹), С-Н (1360-1020 см⁻¹) и С-О (1260-1000 см⁻¹), среднее изменение составляет порядка 0.35%. Сильнее сместились пики колебаний в низкочастотной области, отвечающей деформационным колебаниям О-Н (950-900 см⁻¹), а также колебаниям самой решетки, их изменение в среднем составило порядка 10%.

В ходе данной работы были исследованы структурные и оптические изменения кристалла иодида холина под давлением. Результаты расчетов позволяют сделать вывод о незначительном изменении в структуре самих молекул в зависимости от давления. Наибольшим изменениям подверглась структура элементарной ячейки.

Литература

1. Patryk Przygocki // Journal of Power Sources. 2019. № 427. С. 283–292.
2. Tomoya Shimono // Chemistry letters. 2017. Т. 47. № 3. С. 261-264.
3. R. Dovesi // WIREs Comput. Mol. Sci. 2018. С.1360.
4. S. Grimme // Chem. Phys. 2010. Т. 132. С.154104.
5. M.E. Senko and D.H. Templeton // Acta Cryst. 1960. № 13.С. 281
6. J. Hiortas and H. Sorum // Acta Crystallogr. Sect. E. 1971. № 27. С. 1320

УДК 538.9

Тепловое расширение монокристаллических пленок со структурой феррит-гранатов

Г.С. Максимов

Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского

Знание теплового поведения эпитаксиальных монокристаллических пленок необходимо при практическом использовании пленок при повышенной температуре и при выборе подложек со схожим значением коэффициента теплового расширения (КТР), [1]. Основным критерием совершенства кристаллической структуры эпитаксиальных пленок является различие в размерах элементарных ячеек кристаллической решетки сопрягающихся материалов пленки и подложки - $\Delta a = a_{\text{подложки}} - a_{\text{пленки}}$. Одним из методов исследования изменения кристаллической структуры под воздействием температуры является метод высокотемпературной рентгеновской дифрактометрии, [2].

В работе была исследована феррит-гранатовая монокристаллическая пленка с ориентацией (111), выращенная на подложке из галлий-гадолиниевого граната. Исследования проводились методом рентгеноструктурного анализа на дифрактометре XRD 700 Shimadzu. Съемка производилась в $\text{Cu K}\alpha$ -излучении с использованием графитового монохроматора, в высокотемпературной камере Shimadzu при температурах 17, 100, 200, 300, 400, 500°C.

Размеры элементарных кубических ячеек пленки и подложки рассчитывались по формуле:

$$a = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad (1)$$

Погрешность определения параметра ячейки в условиях термостатирования образца определяется погрешностью определения положения линии (hkl) и составляет 0.0001 Å. Данные представлены на рис.1.

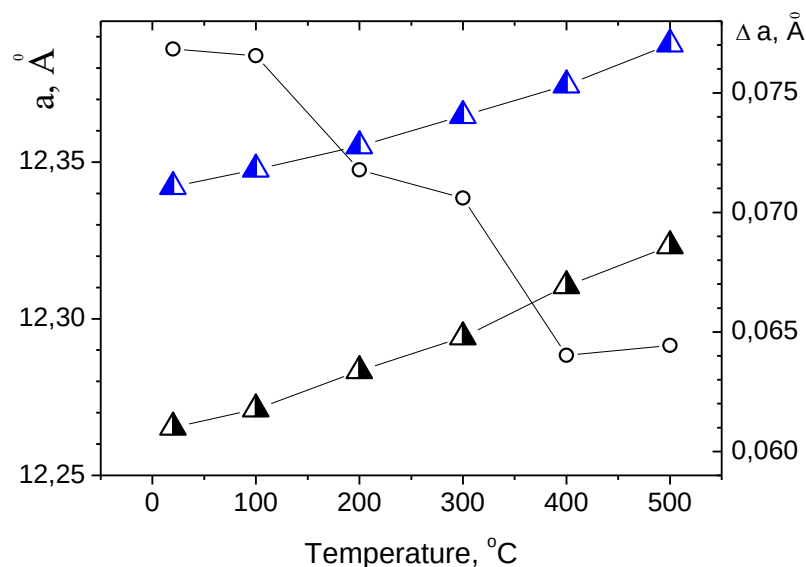


Рис. 1. Температурная зависимость параметров элементарной решётки, рассчитанных из положения линий (444) (левая ось: синие треугольники – подложка, черные треугольники - пленка) и разность этих параметров как функция температуры (кружки, правая ось).

Установлено, что КТР пленки в интервале от 20 до 500°С равен $9,8 \cdot 10^{-6} \frac{1}{K}$. При термическом расширении пленки и подложки их рассогласование Δa уменьшается с увеличением температуры.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю доц. Максимовой Е.М.

В работе использовался образец феррит-гранатовой пленки, выращенной в Научно-исследовательском центре Функциональных материалов и нанотехнологий Физико-технического института Крымского федерального университета имени В.И. Вернадского.

Литература

1. Захарова М.А., Кудрявцева В.Л., Чудинова Е.А., Ерофеева Г.В. Тепловое расширение тонких пленок различной структуры при нагревании // СОВРЕМЕННЫЕ НАУКОЕМКИЕ ТЕХНОЛОГИИ №2, 2015 С. 58-62.
2. Y. Zoo, D. Adams, J.W. Mayer, T.L. Alford. Investigation of coefficient of thermal expansion of silver thin film on different substrates using X-ray diffraction // Thin Solid Films 513. 2006. P. 170–174.

УДК 621.362

Теплофизические свойства твердых растворов Mg_2Si - Mg_2Sn с включением наноразмерных частиц TiO_2

К.Л. Самусевич¹, Г.Н. Исаченко^{1,2}, А.В. Асач¹, В.А. Крылов¹

¹Университет ИТМО

²Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

Последние десятилетия наблюдается активное развитие промышленности и увеличение производственных мощностей, что поднимает вопросы экологии и рационального использования ресурсов. В связи с этим наблюдается интенсивный спрос на устойчивые и экологически безопасные источники энергии, что делает актуальным разработку и использование устройств альтернативной энергетики и дает значительный толчок для развития новых зеленых технологий.

Одними из таких устройств являются термоэлектрические преобразователи энергии, которые привлекают к себе особое внимание в качестве потенциально источника энергии. Главным недостатком таких устройств является низкая эффективность, которая сильно ограничивает область их применения до специфических и уникальных.

Максимальное значение КПД термоэлектрического генератора напрямую зависит от свойств материалов, составляющих его. Главный параметр, связывающий свойства материала и

КПД модуля, называется термоэлектрической добротностью и зависит от термоэдс, электропроводности и теплопроводности.

В настоящее время существует несколько подходов по повышению термоэлектрической добротности, но большая часть исследований направлена на увеличение отношения электропроводности к теплопроводности, что на практике означает снижение теплопроводности при минимальном ущербе для подвижности свободных носителей заряда. Наиболее перспективным и мало изученным методом по снижению теплопроводности твердых растворов является включение наноразмерных частиц в основную матрицу материала [1-2]. Основной задачей нановключений является понижение теплопроводности до значений ниже, чем у исходного соединения, путем эффективного рассеивания фононов, практически не затрагивая электронный транспорт.

В исследуемых материалах на основе силицида магния, теплопроводность уже сильно снижена благодаря подавлению коротковолновых фононов при образовании твердых растворов [3]. Исследование дополнительных механизмов ее подавления представляет практический интерес, так как силициды рассматриваются в качестве альтернативной замены материалов на основе PbTe - источников токсичных отходов. [3-4]. В данной работе исследуется влияние нановключений TiO_2 на теплопроводность и удельную теплоемкость твердых растворов $\text{Mg}_2\text{Si-Mg}_2\text{Sn}$ p и n -типа проводимости ($p\text{-Mg}_2\text{Si}_{0.3}\text{Sn}_{0.7}$ и $n\text{-Mg}_2\text{Si}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$). Базовый состав твердого раствора был синтезирован непосредственным индукционным нагревом полем высокочастотного генератора. Затем слиток был раздроблен и смешан в соответствующей пропорции с диоксидом титана и размолот в планетарно-шаровой мельнице до наноразмерного порошка, последний консолидирован в объемный образец горячим прессованием. На образцах измерены температурные зависимости теплопроводности и удельной теплоемкости в диапазоне от комнатной температуры до 250°C .

В работе показано, что присутствие нановключений увеличивает теплоемкость материала, которое не описывается правилом Неймана-Коппа. При этом заметное снижение теплопроводности наблюдается только на твердом растворе $\text{Mg}_2\text{Si}_{0.3}\text{Sn}_{0.7}$ p -типа проводимости (рис. 1). А в $n\text{-Mg}_2\text{Si}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ теплопроводность растет с увеличением концентрации TiO_2 за счет роста теплоемкости и при снижении температуропроводности (рис. 2).

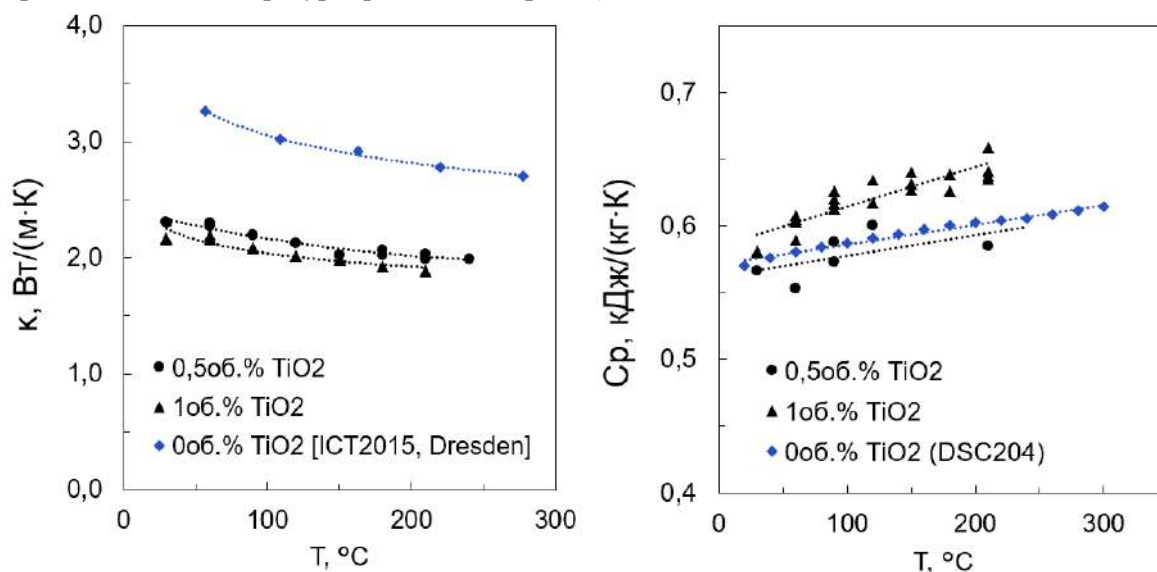


Рис. 1 Температурная зависимость теплопроводности и удельной теплоемкости $\text{Mg}_2\text{Si}_{0.3}\text{Sn}_{0.7}$

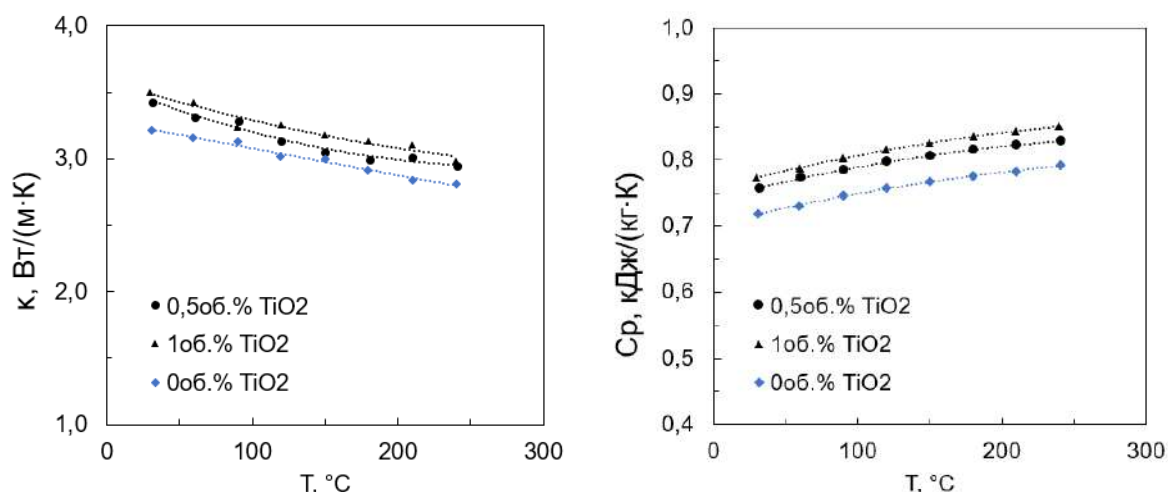


Рис. 2 Температурная зависимость теплопроводности и удельной теплоемкости $\text{Mg}_2\text{Si}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$

Литература

1. Mingo N. "Nanoparticle-in-Alloy" Approach to Efficient Thermoelectrics: Silicides in SiGe / N. Mingo, D. Hauser, N.P. Kobayashi, M. Plissonnier et al. // Nano Letters. – 2009. – 9. – 711-715.
2. Wang S. Improved thermoelectric properties of $\text{Mg}_2\text{Si}_x\text{Ge}_y\text{Sn}_{1-x-y}$ nanoparticle-in-alloy materials / S. Wang, N. Mingo // Applied Physics Letters. – 2009. – 94. – 203109.
3. Zaitsev V.K. Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano / V.K. Zaitsev, M.I. Fedorov, I.S. Eremin, E.A. Gurieva. – Boca Raton: CRC Press, 2006. – 1022.
4. Khan A. High thermoelectric figure of merit of $\text{Mg}_2\text{Si}_{0.55}\text{Sn}_{0.4}\text{Ge}_{0.05}$ materials doped with Bi and Sb / Khan A, Vlachos N, Kyratsi T. // Scripta Materialia. – 2013. – 69. – 606.

УДК 666.3:535.37

Фотолюминесценция YSZ керамик активированных европием

П.Д. Жвакина

Томский политехнический университет (национальный исследовательский университет)

Поликристаллическая прозрачная керамика все чаще становится предметом исследований. Это происходит, прежде всего, из-за ее уникального сочетания свойств. Ее устойчивость к износу, химическая инертность, высокая термическая и коррозионная стойкость, а также оптические свойства, такие как высокий показатель преломления и число Аббе, делают прозрачную керамику важным целевым материалом для различных применений. Перспективным керамическим материалом является керамика на основе иттрий стабилизированного диоксида циркония (YSZ). Обладая высокими механическими и функциональными свойствами, она также имеет показатель преломления около 2,2 в видимой области спектра. В процессе изготовления таких керамик из нанопорошков высокотемпературным прессованием получают материалы с плотностью, близкой к плотности монокристаллов соответствующих соединений, обладающие минимальным рассеянием света, высокой прозрачностью и твердостью. Актуальность использования ионов Eu^{3+} по сравнению с другими РЗЭ обусловлена рядом факторов, в числе которых высокий квантовый выход и интенсивность люминесценции в красной области спектра, легко интерпретируемая схема оптических переходов и наличие узких, хорошо распознаваемых, характеристических, бесфонных (чисто электронных) линий в спектрах излучения [1]. Люминесценция в средах, активированных европием, в меньшей степени подвержена концентрационному тушению в отличие от других РЗЭ, поэтому их, возможно, легировать с высокой концентрацией ионов Eu^{3+} [2]. Целью данной работы было изучение фотолюминесценции керамики изготовленной методом SPS на основе иттрий стабилизированного диоксида циркония активированного европием.

Для изготовления образцов светопропускающей керамики был использован коммерческий гранулированный нанопорошок иттрий стабилизированного диоксида циркония марки TZ-10YS (TOSOH, Япония). Доля стабилизатора Y_2O_3 составляла 10 мол.%. Изготовление керамики осу-

ществовалось на установке SPS-515S (Syntex Inc., Япония). В качестве допанта был использован оксид европия Eu_2O_3 (Неваторг, Россия). В результате спекания были получены керамические образцы цилиндрической формы, высотой 1 мм, диаметром 9 мм. Образцы были подвергнуты атмосферному отжигу при температурах 700-1300 °C.

Интегральную спектральную эффективность измеряли с использованием интегрирующей сферы и калиброванного спектрофотометра AvaSpec-ULS3648. Источником возбуждения служило излучение чипа с $\lambda_{\text{возб}} = 278$ нм. Возбуждение образца также осуществлялось потоком проинтегрированным сферой.

Результаты исследования фотолюминесценции серии образцов YSZ керамики отожженных при 700-1300 °C представлены на рис. 1-2. В спектре фотолюминесценции выделяются несколько характерных пиков свечения иона европия с зарядовым состоянием $3+$. Наиболее интенсивными являются 2 пика, а именно на 605 нм соответствующий электро-дипольному переходу $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$ и 595 нм соответствующий магнито-дипольному переходу $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_1$ [3, 4].

Для измерения плотностных зависимостей фотолюминесценции энергетическая плотность возбуждения на длине волны 278 нм варьировалась в пределах от 118 до 1710 мкДж/см². Результаты измерений представлены на рис. 3-4.

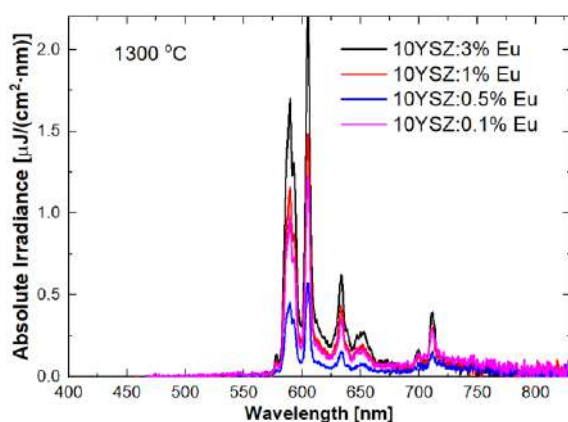


Рис. 1. Спектры интегральной фотолюминесценции образцов YSZ керамики (длина волны возбуждения 278 нм) с концентрацией Eu_2O_3 от 0,1 до 3 масс.% после атмосферного отжига при 1300 °C.

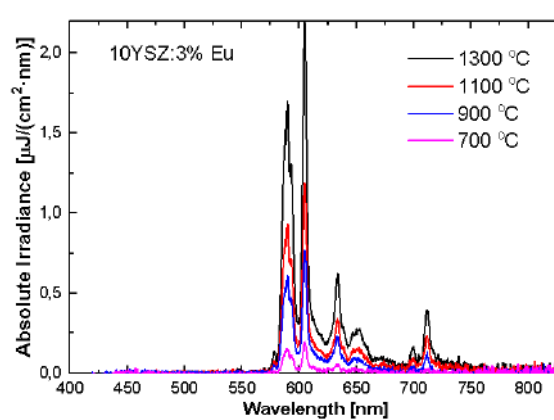


Рис. 2. Спектры интегральной фотолюминесценции образцов YSZ керамики (длина волны возбуждения 278 нм) с 3 масс.% Eu_2O_3 после атмосферного отжига при 700-1300 °C.

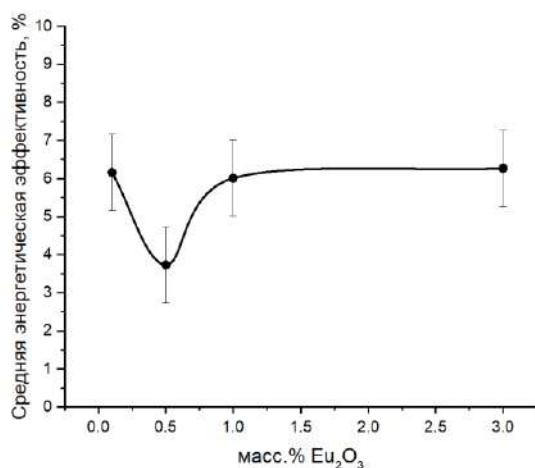


Рис. 3. Зависимость средней энергетической эффективности фотолюминесценции от концентрации европия после атмосферного отжига при 1300 °C.

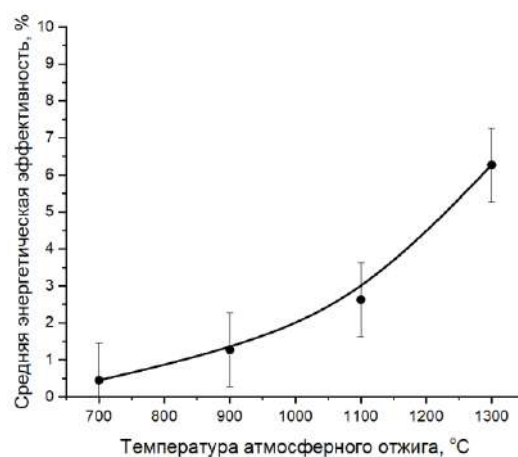


Рис. 4. Зависимость средней энергетической эффективности фотолюминесценции от температуры атмосферного отжига при концентрации европия 3 масс.%.

Результаты показывают, что происходит концентрационное тушение собственного излучения диоксида циркония стабилизированного иттрием. Также видно, что с увеличением концентрации европия наблюдается рост полос излучения характерных иону европия с зарядовым состоянием $3+$. Можно отметить, что увеличение температуры отжига положительно влияет на интенсивность интегральной фотолюминесценции при всех концентрациях европия.

Исследования зависимости энергетической эффективности от плотности возбуждения показывают, что в среднем с изменением плотности возбуждения энергетическая эффективность фотолюминесценции остается постоянной. Также видно, что для образца с содержанием 0,5 масс.% европия наблюдается резкий спад энергетической эффективности.

Литература

1. Chen L., Liu Y., Li Y. Preparation and characterization of $\text{ZrO}_2:\text{Eu}^{3+}$ phosphors // Journal of Alloys and Compounds. 2004. V. 381. P. 266-271.
2. Meetei S. D., Singh S. D., Singh, N. S., Sudarsan V., Ningthoujam R. S., Tyagi M. Crystal structure and photoluminescence correlations in white emitting nanocrystalline $\text{ZrO}_2:\text{Eu}^{3+}$ phosphor: effect of doping and annealing // Journal of Luminescence. 2012. V. 132. P. 537-544.
3. HuiY., ZhaoY., ZhaoS., GuL., FanX., ZhuL., ZouB., WangY., CaoX. Fluorescence of Eu^{3+} as a probe of phase transformation of zirconia // Journal of Alloys and Compounds. 2013. V. 573. P. 177-181;
4. Yu Hui, Binglin Zou, Sanxi Liu, Sumei Zhao, Jiaying Xu, Yu Zhao, Xizhi Fan, Ling Zhu, Ying Wang, Xueqiang Cao. Effects of Eu^{3+} -doping and annealing on structure and fluorescence of zirconia phosphors // Ceramics International. 2015. V. 41. P. 2760-2769.

УДК 537.622

Фрактальная размерность доменной структуры редкоземельного интерметаллида $\text{Sm}(\text{Co,Cu,Fe})_5$ в высококоэрцитивном состоянии

А.И. Синкевич, Г.Г. Дунаева, Д.В. Иванов, А.С. Антонов, Е.М. Семенова, Н.Ю. Сдобняков

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Квазибинарные соединения $\text{Sm}(\text{Co,Cu,Fe})_5$ относятся к классу одноосных высокоанизотропных магнетиков и при этом в литом состоянии характеризуются коэрцитивной силой (H_{cl}) выше 30 кЭ, что связано с наличием регулярных неоднородностей по меди [1,2]. Целью данной работы является анализ их доменной структуры с использованием аппарата фрактальной геометрии. Исходный сплав был получен методом дуговой плавки после чего были проведены две последовательных термических обработки: при $t = 1100^\circ\text{C}$ в течение 6 часов (ТО-1) и затем при $t = 400^\circ\text{C}$ в течение 55 часов (ТО-2). На каждом этапе из сплава выкалывались зерна для магнитных измерений и металлографических исследований. Коэрцитивная сила отожженных образцов измерялась методом вибрационного магнитометра. Регистрация полей рассеяния доменной структуры поверхности осуществлялась методом магнитно-силовой микроскопии (Solver Next). Оценка фрактальной размерности и обработка графических материалов производилась в программном комплексе Image Analysis (версия 3.5.30.19856) [3].

Из результатов магнитных измерений, следует, что на каждом этапе ТО коэрцитивная сила возрастает: после ТО-1 ($H_{cl} = 7$ кЭ), а после ТО-2 ($H_{cl} = 32$ кЭ). На рис. 1 приведены МСМ-изображения доменной структуры (ДС) поверхности этих образцов в размагниченном состоянии. Конфигурация доменов отражает распределение неоднородностей и локальной коэрцитивности после ТО-1 и ТО-2: на рис.1а присутствуют микрообласти с доменной структурой близкой конфигурации но отличающиеся шириной, что соответствует гетерогенной нерегулярной микро- и наноструктуре. Фрактальная размерность такой сложной ДС составила порядка 2,13. При этом после ТО-2 (рис.1б) наблюдается однотипная структура доменов одинаковой ширины, отражающая однородное распределение центров задержки смещения доменных границ. Фрактальная размерность такой ДС составила 2,06. Таким образом, фрактальная размерность соответствующая ДС сплава с более высокой коэрцитивной силой (32 кЭ) имеет меньшее значение, чем тот же параметр для ДС образцов с $H_{cl} = 7$ кЭ.

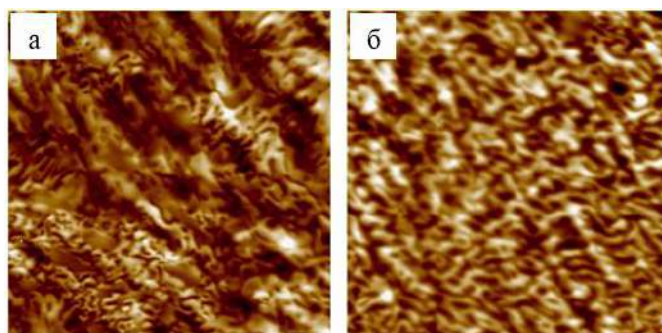


Рис. 1. МСМ-изображение полей рассеяния ДС образцов сплава $\text{Sm}(\text{CoCuFe})_5$ после ТО-1 (а) и ТО-2 (100x100 мкм).

Исследования выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2020-0007) на оборудовании ЦКП ТвГУ.

Литература

1. Gabay A.M., Larson P., Mazin I.I., Hadjipanayis G.C. Magnetic states and structural transformations in $\text{Sm}(\text{Co,Cu})_5$ and $\text{Sm}(\text{Co,Fe,Cu})_5$ permanent magnets // Journal of Physics D: Applied Physics. 2005. V. 38. № 9. P. 1337.
2. Кузнецова Ю.В., Супонев Н.П., Дегтева О.Б., Айриян Э.Л. Анализ рельефа поверхности монокристаллов сплавов $\text{Sm}(\text{Co,Cu})_5$ методами атомно-силовой микроскопии // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2012. Вып. 4. С. 143.
3. Image Analysis P9. Справочное руководство. М.: NT-MDT SI, 2019. 582 с.

Секция фотоники и двумерных материалов

Председатель: А.В. Арсенин (к.ф.-м.н.), В.С. Волков (Ph.D)

Зам. председателя: А.А. Вишневы (к.ф.-м.н.)

Секретарь: И.А. Храмцов

Дата: 24.11.2020 и 25.11.2020 Время: 10:00

УДК 538.958; 538.956

Influence of crystal field distortions on the energetic fine structure of divalent iron in single crystalline lead substituted M-type barium hexaferrite

Asmaa Ahmed^{1,2}, Anatoly S. Prokhorov^{1,3}, Vladimir Anzin^{1,3}, Denis Vinnik⁴, Alexander Bush⁵, Boris Gorshunov¹, Liudmila Alyabyeva¹

¹Moscow Institute of Physics and Technology

²Department of physics, Faculty of science, Sohag University

³Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences

⁴South Ural State University

⁵Research Institute of Solid State Electronics Materials, MIREA – Russian Technological University

Due to specific magnetic and dielectric properties and low cost, undoped M-type barium hexaferrite BaFe₁₂O₁₉ (BaM) is superior in the field of manufacturing of modern electronic devices and components. It is widely used in various microwave devices, high-quality magnetic memory storage, resonators, etc. [1]. It is important, however, that terahertz electrodynamic properties of BaM and doped BaM are still unexplored. Here, we report on an exhaustive investigation of the terahertz and infrared electrodynamics of high-quality single-crystalline Ba_{0.2}Pb_{0.8}Al_{1.2}Fe_{10.8}O₁₉ grown by a Czochralski method.

Using a set of spectrometers, we obtain the spectra of reflectivity $R(\nu)$, transmissivity $Tr(\nu)$, and complex dielectric permittivity $\epsilon^*(\nu) = \epsilon_1(\nu) + i\epsilon_2(\nu)$ of high-quality single-crystalline Ba_{0.2}Pb_{0.8}Al_{1.2}Fe_{10.8}O₁₉, measured over a wide range of frequencies, 8-8000 cm⁻¹, at temperatures 300 K- 6 K. Far-infrared (60-8000 cm⁻¹) reflectivity spectra were measured with the Fourier-transform infrared spectrometer (Bruker Vertex 80v) and complex (amplitude and phase) terahertz (8-100 cm⁻¹) transmissivity spectra were measured with terahertz time-domain spectrometers (Tera K15, Menlo GmbH and TeraView TPS 3000). Using standard Fresnel equations for plane-parallel layer [2], broadband spectra of reflectivity, transmissivity, and complex dielectric permittivity in the range 8-8000 cm⁻¹ are obtained as shown in figure (1). The spectral response was recorded for two principle orientations of the electric field vector $\mathbf{E}$ of incident electromagnetic radiation relative to the main crystallographic axis c , i.e. $\mathbf{E}||c$ and $\mathbf{E}\perp c$.

The obtained spectra were processed using Lorentzian expressions to model absorption lines, thus enabling us to obtain the parameters of each resonance: frequency position ν , dielectric contribution $\Delta\epsilon$, damping factor γ , and oscillator strength $\Delta\epsilon\nu^2$. The high-frequency dielectric constant ϵ_∞ was calculated from middle-infrared spectra and its temperature dependence was found to be negligible. In the far-infrared region (80-1000 cm⁻¹), a rich set of absorption lines was observed for both polarizations that were attributed to lattice vibrations (phonons), basing on the factor group analysis [3].

At sub-terahertz and terahertz frequencies (8-100 cm⁻¹ $\approx$ 0.24- 3.00 THz), a terahertz absorption band is detected that shows splitting into three absorption lines [4] during cooling to helium temperature. The origin of the lines is assigned to electronic transitions within the fine structured ground state of divalent Fe²⁺ iron [5]. Taking into account the trigonal distortion of the crystal field [6] leads to the lowering of the symmetry of 4f₁ and 4e tetrahedral site-positions of Fe²⁺ ion and, thus, to an additional splitting of the ground state spin-orbital sub-levels. According to the selection rules for the 3m (C_{3v}) symmetry, the transitions between the corresponding sub-levels are electro-dipole active.

The performed studies of terahertz electrodynamics shows that relatively high dielectric permittivity values (≈ 30) of pure and doped BaM hexaferrites can be controlled by doping, making these compounds

promising for use in electronics. The obtained results provide with a craving and vital reference information for device designers and material scientists and are helpful in the future manufacture of low-cost electronic devices with enhanced dielectric characteristics.

Acknowledgement. The terahertz study is supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (state contract 075-00337-20-07, project 1740-20) infrared temperature investigation is supported by Russian foundation for Basic Research, grant 20-32-90034

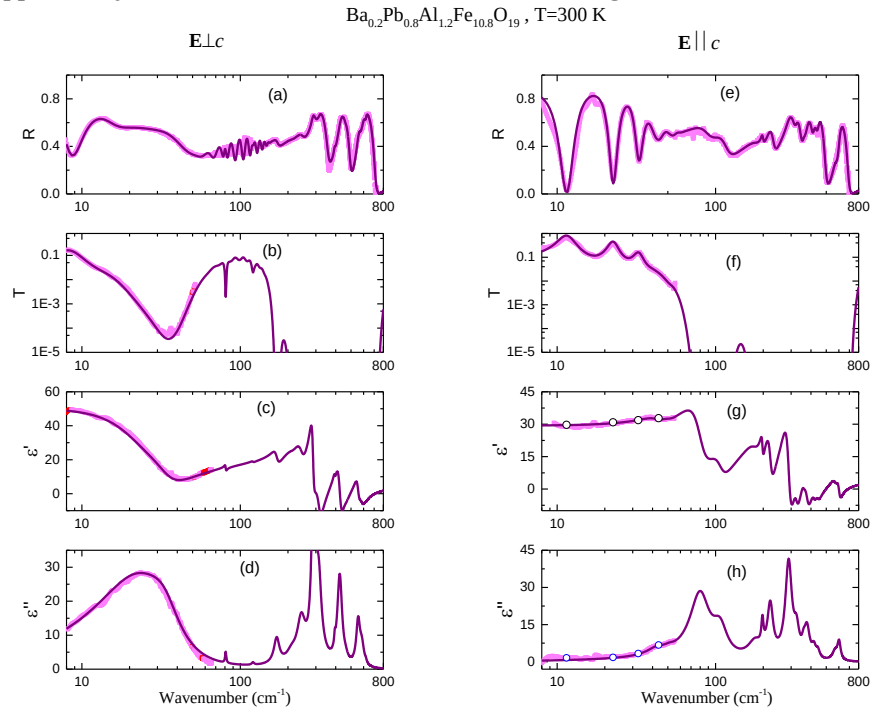


Fig. 1. Panels a,e: reflectivity spectra; panels (b,f): transmissivity spectra; panels (c,g): spectra of real part of dielectric permittivity; panels (d,h): spectra of imaginary part of dielectric permittivity of single-crystalline $\text{Ba}_{0.2}\text{Pb}_{0.8}\text{Al}_{1.2}\text{Fe}_{10.8}\text{O}_{19}$ obtained at room temperature for polarizations $\mathbf{E} \perp c$ (panels a-d) and $\mathbf{E} \parallel c$ (panels e-h). The dots represent the experimental data, the open dots on the panels (g) and (h) are calculated data obtained at frequencies of interferometric maxima of the transmissivity spectra of the plane-parallel sample (thickness $80\text{ }\mu\text{m}$) that provide enhanced accuracy in the determination of dielectric parameters [7]. The solid lines represent the results of the least-square fits with the Lorentzian expressions used to describe the absorption lines and Fresnel expressions to model the spectra of reflectivity and transmissivity of the plane-parallel sample [2].

References

1. Pullar RC. Hexagonal ferrites : A review of the synthesis , properties and applications of hexaferrite ceramics // J Prog Mater Sci. 2012. V. 57. P. 1191–1334.
2. M. Born and E. Wolf. Principles of Optics. 7th edition. Cambridge University Press; 1999.
3. Mikheykin AS, Zhukova ES, Torgashev VI, Razumnaya AG, Yuzyuk YI, Gorshunov BP, et al. Lattice anharmonicity and polar soft mode in ferrimagnetic M-type hexaferrite $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ single crystal // Eur Phys J B. 2014. V. 87. P. 232.
4. Ahmed A, Prokhorov AS, Anzin V, Vinnik D, Bush A, Gorshunov B, et al. Terahertz-infrared electrodynamics of single-crystalline $\text{Ba}_{0.2}\text{Pb}_{0.8}\text{Al}_{1.2}\text{Fe}_{10.8}\text{O}_{19}$ M-type hexaferrite // J Alloys Compd. 2020.V. 836. P. 155462.
5. Alyabyeva LN, Torgashev VI, Zhukova ES, Vinnik DA, Prokhorov AS, Gudkova SA, et al. Influence of chemical substitution on broadband dielectric response of barium-lead M-type hexaferrite // New J Phys. 2019. V. 21. P. 063016
6. Mahoney JP, Lin CC, Brumage WH, Dorman F. Determination of the Spin–Orbit and Trigonal-Field Splittings of the ^5E State of Fe^{2+} in ZnO, ZnS, CdS, ZnSe, CdSe, ZnTe, and CdTe Crystals by Magnetic Susceptibilities // J Chem Phys. 1970. V. 53. P. 4286.
7. Gorshunov B, Volkov A, Spektor I, Prokhorov A, Mukhin A, Dressel M, et al. Terahertz BWO-spectroscopy // Int J Infrared Millimeter Waves. 2005. V. 26 No 9. P. 1217.

Влияние электрического поля на адсорбционные свойства поверхности

А.К. Нухов^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Институт физики ДФИЦ РАН

Влияние электрического и магнитного полей на состояние поверхности с адсорбированными атомами может быть выражено в изменении уровней поверхностной энергии [1,2].

Мы провели расчёт числа заполнения для системы Na/Ni(110) в зависимости от расстояния, приложенного электрического поля, длины электронного отклика и эффектов корреляции.

Произведённый нами расчёт числа заполнения $n_a^{\pm\sigma}$ соответствующих уровней энергии $E_a^{\pm\sigma}$ при $S_0=0.987 \text{ \AA}^\circ$ для различных значений приложенного электрического поля как функции внешнего поля показывает резко выраженные пики, как на расстоянии $S=30 \text{ \AA}^\circ$, так и при $S=0$. Из этого расчёта следует, что число заполнений $n_a^{\pm\sigma}$ уменьшается для всех расстояний с ростом приложенного поля. Однако величина плотности состояний адатома уменьшается с увеличением приложенного поля на поверхности, где решения являются немагнитными ($n_a^\sigma = n_a^{-\sigma}$) независимо от того существует поле или нет.

Можно сделать вывод, что ионный вклад в энергии хемосорбции $E_{\text{сн}}$ (в энергию связи) преобладает при всех значениях приложенного поля, и этот вклад возрастает с ростом приложенного поля, в отличие от металлического вклада.

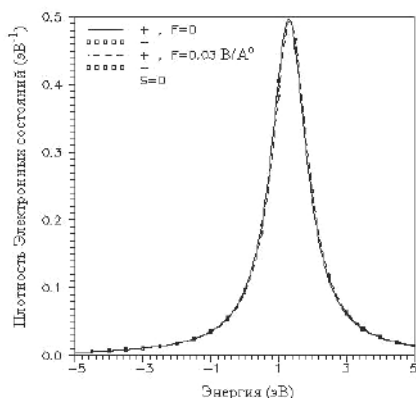


Рис. 1: Плотность состояний адатомов на поверхности ($S=0$)

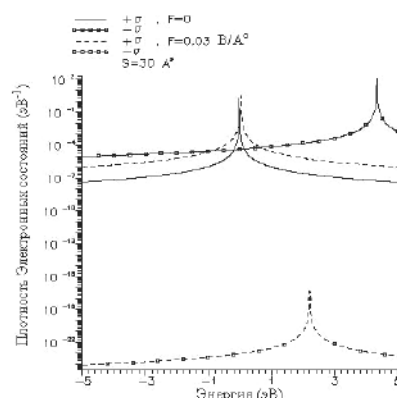


Рис. 2: Плотность состояний адатомов на расстоянии ($S=30 \text{ \AA}^\circ$) от поверхности

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России (0714-2020-0002).

Литература

1. Tsong T.T. Experimental studies of behavior of single adsorbed atoms on solid surfaces.// Rep.Progr.Phys. 1988. Vol. 51. №6. Pp. 759.
2. Nukhov A.K. et al . Use of the adsorption properties of graphene to create metamaterialsJournal of Physics: Conf. Series 1461 (2020) 012122.

Возбуждение локализованных плазмонов в графене с помощью аperiодических самоорганизованных массивов металлических антенн

В.Е. Кайдашев¹, Б.Н. Хлебцов², А.В. Мяконьких³, Е.С. Жукова¹, С.С. Жуков¹, Д.А. Мыльников¹, И.К. Домарацкий¹, Д.А. Свинцов¹

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Института биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН

³ Физико-технологический институт им. К.А.Валиева РАН

Для плазмонов в двумерных электронных системах характерна сильно суб-длинноволновая локализация электромагнитного излучения до характерных размеров порядка $\lambda_0/100$, где λ_0 — это длина волны излучения в свободном пространстве. Такие замечательные свойства плазмонов открывают широкие возможности их использования в областях фотодетектирования [1], эмиссии [2] и модуляции [3] электромагнитного излучения, а также для био-сенсоров [4].

Сильная локализация плазмонов в двумерных материалах приводит к значительному различию волновых векторов для плазмона и фотона в свободном пространстве. Таким образом, для возбуждения плазмонов в двумерных материалах необходимы согласующие устройства, например дифракционные решетки, с суб-микронными элементами [5]. Так, типичный размер элемента решетки должен иметь размер порядка ~ 300 - 100 нм для возбуждения графеновых плазмонов в диапазоне 1-30 ТГц и порядка ~ 100 - 10 нм для плазмонов в среднем ИК диапазоне (30-60 ТГц) [4].

Массовое производство периодических суб-длинноволновых решеток с помощью электронно-лучевой литографии является трудозатратной и дорогой технологией, особенно когда речь идет о макроскопических элементах (размером несколько миллиметров), которые требуются для ТГц и ИК устройств генерации гармоник.

В данной работе нами предложен новый подход к генерации локализованных плазмонов в графене на больших площадях (~ 1 см²) используя квазиоднородный массив случайно расположенных Au наностержней сильно связанных с графеном (Рис. 1a,b), которые играют роль согласователей волновых векторов вместо решетки.

Отсутствие симметрии в массиве наностержней, разориентированных случайным образом, делает невозможным использование стандартного поряизационно чувствительного способа для детектирования плазмонов. Мы применили оригинальный подход для преодоления этих экспериментальных трудностей. А именно, мы использовали непрямой метод для мониторинга процесса генерации плазмонов путем отслеживания изменений в спектрах поглощения/отражения особенностей линий молекул “репортеров” метилена голубого или полиметилметакрилата. Данные молекулы имеют характерную “решетку” узких линий молекулярных осцилляций в диапазоне, в котором возбуждается плазмон в графене при помощи характерных длин/диаметров наностержней. Повышение локальных электрических полей вблизи слоя графена при возбуждении в нем плазмона приводит к увеличению сил молекулярных осцилляторов (увеличению интенсивности линий), а также к сдвигу линий в спектрах отражения в результате рассеяния Фано при гибридизации широкого графенового плазмонного резонанса и узких молекулярных осцилляторов, как показано на Рис. 1с. Отслеживая увеличение сил в “решетке” различных молекулярных осцилляторов, можно обнаружить спектральный диапазон возбуждаемого графенового плазмона (Рис. 1d).

Примененный нами подход для возбуждения ИК плазмонов с помощью самоорганизованных наночастиц существенно упрощает процесс изготовления устройств и ускорит развитие новых дешевых устройств на основе двумерных материалов для детектирования излучений, генерации ТГц гармоник, супер-разрешающей ИК микроскопии и других.

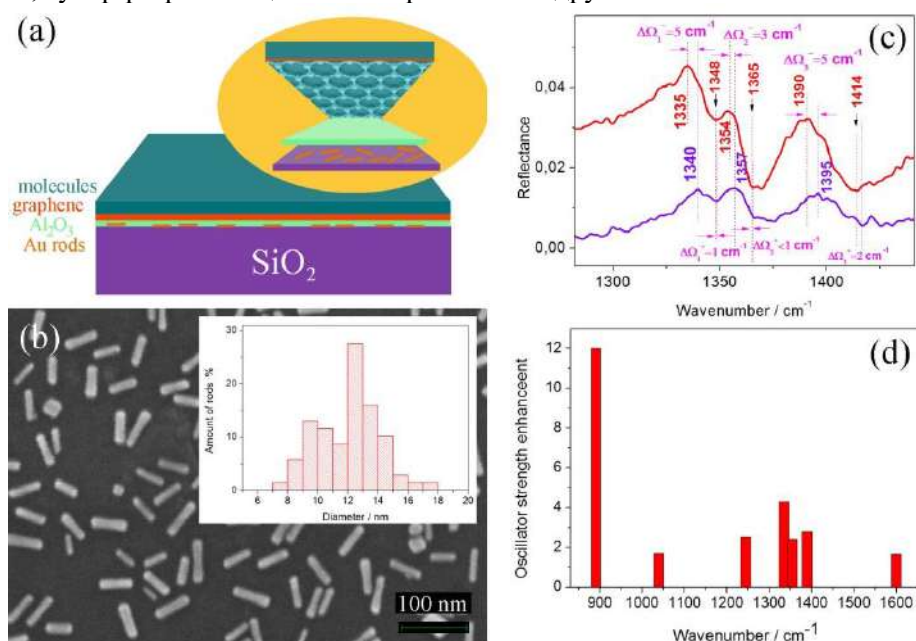


Рис. 1. Многослойная структура графен/ Al_2O_3 /Au-стержни (a); SEM изображение массива Au наностержней на подложке SiO_2/Si (b); распределение диаметров Au стержней во вкладке. Спектры отражения от структуры молекулы MB (10^{-2} М)/графен/ Al_2O_3 /50 нм Au стержни/ SiO_2 измеренные в областях с графеном и без, иллюстрирующие сдвиг и усиление сил осцилляторов при возбуждении графенового плазмона (c); Увеличение сил молекулярных осцилляторов наведённое графеном, позволяющее проследить спектральный диапазон возбужденного плазмона (d).

Изготовление образцов и исследование ИК свойств, спектров КР и моделирование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 16-19-10557. Образцы изготовлены с использованием оборудования ЦКП МФТИ при поддержке Министерства Науки и Высшего образования, грант № RFMEFI59417X0014 (МФТИ) и № 066-2019-0004 (ФТИАН). Изучение свойств оптического поглощения проводилось при финансовой поддержке проекта РФФИ №18-02-00151А.

Литература

1. Echtermeyer T. J., Britnell L., Jasnós P. K., Lombardo A., Gorbachev R. V., Grigorenko A. N., Geim A. K., Ferrari A. C., Novoselov K. S. 2011 *Nat. Commun.* 2 458
2. Meziani Y. M., Handa H., Knap W., Otsuji T., Sano E., Popov V. V., Tsybalov G. M., Coquillat D., Teppe F. 2008 *Appl. Phys. Lett.* 92 201108
3. Ansell D., Radko I. P., Han Z., Rodriguez F. J., Bozhevolnyi S. I., Grigorenko A. N. 2015 *Nat. Commun.* 6 1
4. Rodrigo D., Limaj O., Janner D., Etezadi D., Abajo F. J. G., Pruneri V., Altug H. 2015 *Science* 349 165
5. Gao W., Shi G., Jin Z., Shu J., Zhang Q., Vajtai R., Ajayan P. M., Kono J., Xu Q. 2013 *Nano Lett.* 13 3698

УДК 535.3

Возбуждение поверхностных плазменных волн постоянным электрическим током

Е.А. Примаков, А.С. Петров

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Поверхностный плазмон — это коллективное возбуждение зарядовой плотности, существующее на границе объёмной (трехмерной) электронной системы. Поверхностный плазмон был теоретически предсказан Р. Ритчи в 1957 году [1], и с тех пор тщательно изучен [2]. Собственная частота поверхностного плазмона обычно лежит вблизи оптического диапазона для стандартных проводников (медь, золото). Поэтому поверхностные плазмоны удобно возбуждать электромагнитным излучением видимого или ближнего ИК диапазона, предварительно позаботившись о согласовании волновых векторов плазмона и фотона (например, используют схему Кречмана или решётчатый затвор).

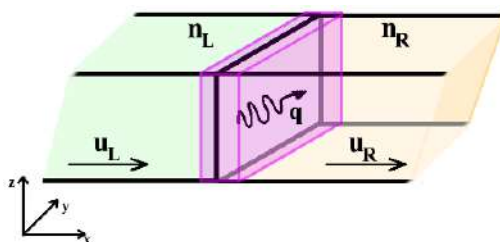


Рис. 1 Рассматриваемая модель, где u_L , u_R и n_L , n_R — дрейфовые скорости в металлах и концентрации электронов в них; q — волновой вектор возбуждаемой моды.

В данной работе мы предлагаем новый, электрический, метод возбуждения поверхностных плазмонов — возбуждение постоянным электрическим током. А именно, мы предсказываем, что при пропускании постоянного электрического тока поперёк контакта двух полупроводников (или металлов) с различной плотностью носителей n_L и n_R , на контакте будет возбуждаться поверхностный плазмон (рис. 1). Подобный механизм был предложен одним из авторов для возбуждения краевых плазменных мод на границе двумерных электронных систем [3].

Для описания электронного транспорта мы используем систему уравнений гидродинамики и электростатики, являющуюся общепринятой в данной области [4,5]. В результате получили дисперсионное уравнение на спектр поверхностного плазмона:

$$2i\omega = \left(\frac{\omega_{left}^2}{q v_{left} - i\omega - \frac{1}{\tau}} - \frac{\omega_{right}^2}{-q v_{right} + i\omega + \frac{1}{\tau}} \right), \quad (1)$$

где ω_{right} , ω_{left} и v_{right} , v_{left} — соответственно собственные плазменные частоты соприкасающихся полупроводников(металлов) и скорости дрейфа в них электронов; q — волновой вектор, а ω — искомая частота возбуждаемого поверхностного плазмона, τ — эффективное время релаксации.

Отметим, что в отсутствие дрейфа и получается известный результат для частоты поверхностного плазмона на границе двух проводящих областей

$$\omega_{inter-surface} = \sqrt{\frac{\omega_{left}^2 + \omega_{right}^2}{2}}, \quad (2)$$

где ω_{right} , ω_{left} — собственные объёмные плазменные частоты соприкасающихся полупроводников (металлов). В присутствие слабого дрейфа эта мода приобретает небольшую положительную мнимую добавку (что соответствует нарастанию колебаний), которая, однако, много меньше столкновительного затухания и интереса не представляет.

В то же время при ненулевой скорости дрейфа возникает новая мода с чисто мнимым спектром:

$$\omega = i \frac{n_{left} - n_{right}}{n_{right} \cdot n_{left}} q j_0, \quad (3)$$

где n_L , n_R — концентрации электронов в соответствующих областях, ω и q — соответственно плазменная частота и волновой вектор искомой моды, j_0 — вектор поток электронов.

Это аналог чисто турбулентной краевой моды, обнаруженной М. Дьяконовым [6]. Однако столкновительное затухание способно подавить развитие неустойчивости. Для количественной оценки мы взяли параметры, типичные для дифосфида вольфрама WP2 при 77 К [7]: концентрация электронов $n = [10^{21}; 10^{22}]$ см⁻³, подвижности $\mu \approx 110$ см² (В с)⁻¹, эффективная масса электрона $m_* = 1.21 m_0$, и получили, что при скорости дрейфа $v_{crit} \approx 10^7$ см/с мода становится турбулентной.

Таким образом, мы предсказываем возможность возбуждения поверхностного плазмона постоянным электрическим током. Для оценки действительной части частоты возбуждаемой моды необходимы дальнейшие исследования, которые будут проведены в ближайшее время.

Литература

1. Ritchie, Rufus H. Plasma losses by fast electrons in thin films. *Phys.rev.* 106.5 (1957): 874.
2. Maier, Stefan Alexander. *Plasmonics: fundamentals and applications*. 2007.
3. Aleksandr S. Petrov and Dmitry Svintsov 2020 *Phys. Rev. B* 102, 121402(R).
4. Dyakonov, Shur PRL Shallow water analogy 1993 *Phys. Rev. Lett.* 71, 2465
5. Krashenninnikov, M. V., and A. V. Chaplik. Instabilities of two-dimensional plasma waves. *Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki* 79 1980 555-560.
6. M. I. Dyakonov Boundary Instability of a Two-Dimensional Electron Fluid. ISSN 1063-7826, *Semiconductors*, 2008, Vol. 42, No. 8, pp. 984–988
7. J. Gooth *et al.* Thermal and electrical signatures of a hydrodynamic electron fluid in WP2. 2017 arXiv:1706.05925

УДК 538.955

Генерация спиновых токов в структуре фотонный кристалл/BIG/Pt с помощью лазерного нагрева

**П.В. Пенкина^{1,2}, Д.О. Игнатьева^{3,4}, П.О. Капралов³, С.К. Секацкий⁵, М. Нюр-Е-Алам⁶,
М. Васильев⁶, К. Аламех⁶, А.К. Звездин^{1,2}, В.И. Белотелов^{3,4}**

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики

³Российский квантовый центр

⁴Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

⁵École Polytechnique Fédérale de Lausanne

⁶Edith Cowan University

В данной работе продемонстрировано возбуждение спинового тока в структуре, содержащей фотонный кристалл, ферромагнитный слой из висмут замещенного феррит-граната $\text{Bi}_{2.1}\text{Dy}_{0.9}\text{Fe}_{3.9}\text{Ga}_{1.1}\text{O}_{12}$ (BIG) и слой платины, обладающий большим спин-орбитальным взаимодействием (рис.1). Облучая образец лазером, мы нагреваем его, и в ферромагнетике создается градиент температур, вдоль которого, благодаря спиновому эффекту Зеебека течет спиновый ток [1,2]. Спиновый ток инжектируется в слой с большим спин-орбитальным взаимодействием, где перпендикулярно ему благодаря обратному спиновому эффекту Холла течет зарядовый ток.

Фотонный кристалл влияет на угловые спектры отражения и поглощения исследуемого образца. Наблюдаемый оптический резонанс связан с возбуждением поверхностной волны, удерживаемой в магнитном слое, с одной стороны, за счет запрещенной зоны фотонного кристалла, а с другой стороны – за счет эффекта полного внутреннего отражения на границе феррит-гранат/платина[3,4]. Высокодобротный резонанс поглощения обеспечивает увеличение индуцированного спин-ового тока и измеренного напряжения обратного спин-ового эффекта Холла.

Также, было проведено моделирование оптических свойств структур на основе фотонных кристаллов и была предложена оптимальная наноструктура для эффективной генерации спин-ового тока.

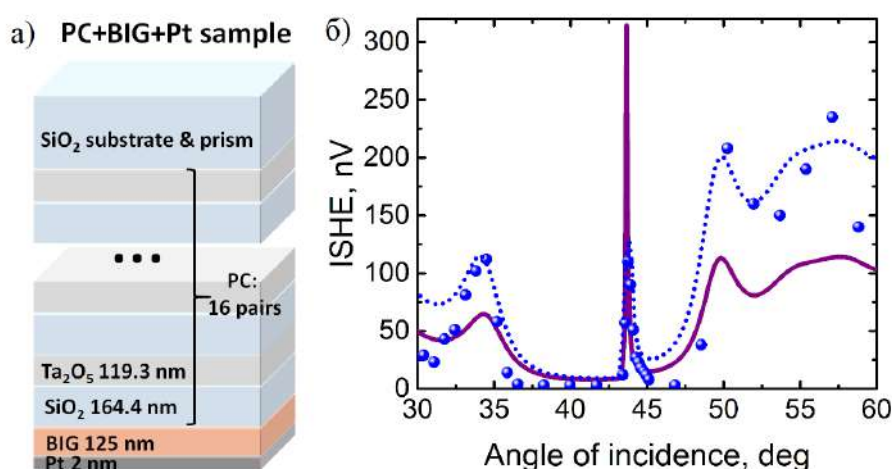


Рис. 1. (а) Схематическое изображение исследуемого образца, (б) Экспериментальный (синие точки) и теоретический (синяя пунктирная линия) угловой спектр напряжения обратного спин-ового эффекта Холла. Фиолетовая кривая демонстрирует угловой спектр для оптимальной смоделированной наноструктуры, содержащей фотонный кристалл.

П.В.П., А.К.З. благодарят РФФ (проект N 17-12-01333), а Д.О.И., П.О.К., и В.И.Б. благодарят РФФИ (проект N 18-52-80038) за финансовую поддержку.

Литература

1. Uchida K. et al. Observation of the spin Seebeck effect //Nature. – 2008. – Т. 455. – №. 7214. – С. 778-781.
2. Uchida K. et al. Spin seebeck insulator //Nature materials. – 2010. – Т. 9. – №. 11. – С. 894-897.
3. Ignatyeva D. O. et al. Magneto-optical plasmonic heterostructure with ultranarrow resonance for sensing applications //Scientific reports. – 2016. – Т. 6. – С. 28077.
4. Ignatyeva D. O. et al. High-Q surface modes in photonic crystal/iron garnet film heterostructures for sensor applications //JETP letters. – 2016. – Т. 104. – №. 10. – С. 679-684.

УДК 535-46

Гигантская анизотропия в природных ван-дер-ваальсовых материалах для фотоники следующего поколения

Г.А. Ермолаев¹, Д.В. Грудинин¹, К.В. Воронин,¹ Д.Г. Баранов¹, Д.И. Якубовский¹, А. Былинкин¹, Г.И. Целиков¹, С.М. Новиков,¹ А.Б. Мазитов,¹ И.А. Круглов,¹ А.В. Арсенин¹, В.С. Волков¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Несмотря на огромное количество исследований в области ван-дер-ваальсовых материалов, до сих пор исследователи в основном интересуются искусственно собранными гетероструктурами. Тем не менее объемные аналоги двумерных материалов являются природными гетероструктурами, так как их слои разделены между собой ван-дер-ваальсовым зазором воздуха. Данный эффект лежит в основе многих интригующих открытий в современной физике. Например, экситонные поляритоны с длиной пробега, превышающей сотни микрометров [1]. Оказывается, что многие явления объясняются огромной оптической анизотропией, которую удалось померить только в недавнее время благодаря развитию спектроскопических методов эллипсометрии и ближнепольной микроскопии [2, 3]. Более того, авторам удалось продемонстрировать, что ван-дер-ваальсовые материалы позволяют преодолеть дифракционный предел в волноведущих структурах как показано на рисунке 1, что делает данные материалы привлекательными для фотонных чипов.

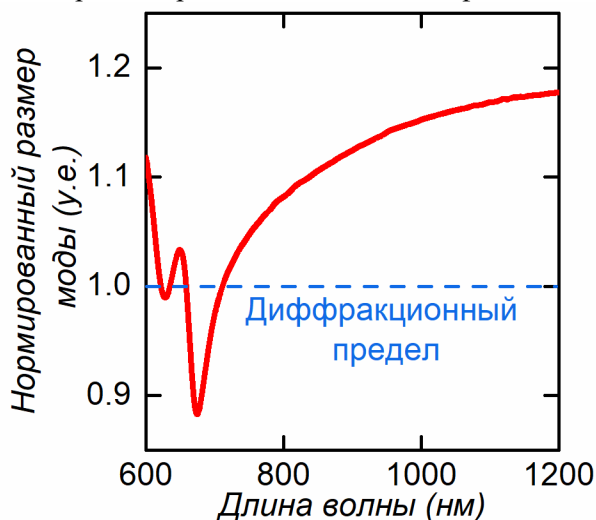


Рис. 14. Размер волноводной моды в планарном волноводе $\text{MoS}_2/\text{Si}/\text{MoS}_2$ в зависимости от длины волны света. В диапазоне длин волн от 650 до 700 нм анизотропия позволяет преодолеть дифракционный предел

Работа выполнена при частичной поддержке Минобрнауки России (0714-2020-0002) и РФФИ (20-07-00475, 18-29-02089, 18-07-01379 и 18-37-20061).

Литература

1. Hu F. et al. Imaging exciton–polariton transport in MoSe_2 waveguides // Nature Photonics. 2017. V. 11. P. 356.
2. Ermolaev G.A. et al. Giant optical anisotropy for next-generation photonics // arXiv:2006.00884. 2020.
3. Ermolaev G.A. et al. Giant optical anisotropy in natural van der Waals materials for next-generation photonics // 10th edition of Graphene Conference series, the largest European Event in Graphene and 2D Materials (Graphene 2020), Grenoble, France.

УДК 535.015

ГКР-активные наноструктуры для высокочувствительного анализа живых клеток

Н.В. Дорошина¹, Д.И. Якубовский¹, С.М. Новиков¹, А.А. Ушков^{1,2}, Н.А. Браже³, А.Б. Евлюхин¹, Д.А. Горин⁴, М.Д. Мокроусов⁴, А.Б. Немцов¹, А.А. Воронов¹, А.В. Арсенин¹, В.С. Волков¹

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Institute of Optics Graduate School, Laboratoire Hubert Curien

³Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

⁴Сколковский институт науки и технологий

В работе рассмотрены возможности высокочувствительного гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) для диагностики патологий. ГКР - мощный и высокоселективный инструмент для химической идентификации и определения структуры материалов и молекул на основе их специфических колебательных связей [1-2]. Сильные эффекты ГКР, полученные с использованием плазмонных наноструктур, позволяют обнаруживать молекулы при чрезвычайно низких концентрациях.

Тем не менее, мощный ГКР эффект возникает в случае, когда расстояние между поверхностью наноструктур и исследуемой молекулой относительно невелико $\sim 1-5$ нм, при этом многие патологии могут быть диагностированы по выявлению процессов, происходящих в субмембранной области, на расстоянии $\sim 10-25$ нм. Здесь мы демонстрируем возможность обойти эти ограничения за счет плазмонных наноструктур с адаптированной под биообъекты геометрией. Специфическая геометрия подложек представляет собой ячеистую структуру, необходимую для повышения площади контакта между подложкой и исследуемыми объектами и получения сигнала на требуемых для диагностики патологий дальних расстояниях.

Мы использовали ячеистые диэлектрические подложки с периодом 950 нм, которые были сформированы с помощью лазерной интерференционной литографии [3]. За счет контролируемых параметров предварительного экспонирования и проявления периодическая ячеистая структура полусферических полостей (ячеек) с заданным радиусом была адаптирована для биообъектов. Ячеистые структуры были покрыты серебряной пленкой (~ 100 нм) методом электронно-лучевого осаждения в высоком вакууме. Затем на эти подложки наносились наносферы серебра диаметром $\sim 50-80$ нм (рис. 1).

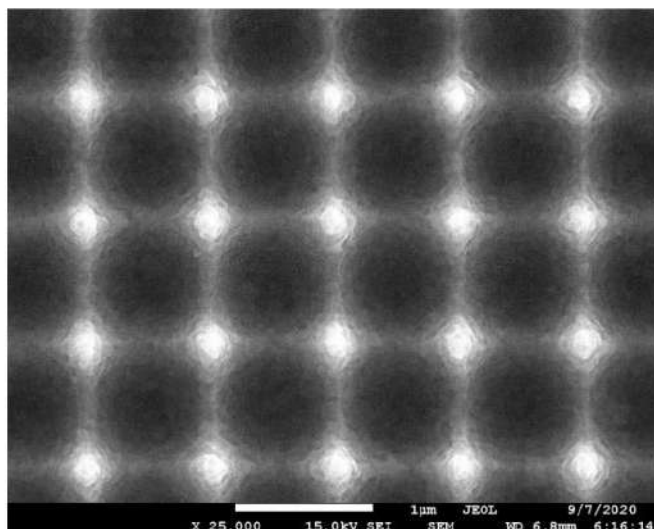


Рис. 1. SEM-изображение поверхности подложек после напыления серебра

Особая ячеистая геометрия поверхности и её наноструктурирование позволяет получить значительные эффекты усиления электромагнитного поля в ближней зоне за счет нормальных составляющих дипольных моментов частиц, расположенных на подложке. При нормальном освещении такой системы электрический дипольный момент, направленный вдоль электрического поля световой волны, будет резонансно возбужден в наночастицах. Для тех частиц, которые расположены на боковых поверхностях полостей, эти дипольные моменты будут перпендикулярны поверхности, что приведет к значительному увеличению из-за эффекта отражения. В результате на боковой поверхности полости будет индуцировано сильное электрическое поле, что позволит получить сильный ГКР сигнал с дальних расстояний от биообъектов, помещенных в эти полости [3].

Применимость полученных наноструктур исследуется с использованием специальных микрокапсул с сердцевинкой из диоксида кремния с нанесенным на нее слоем родамина 6G (R6G) и следующими слоями полимера Poly (4-стиролсульфоната натрия) (рис. 2). Микрокапсулы изготовлены методом послойного осаждения [4]. Глубина расположения слоя R6G внутри микрокапсулы варьировалась количеством полимеров на нем.

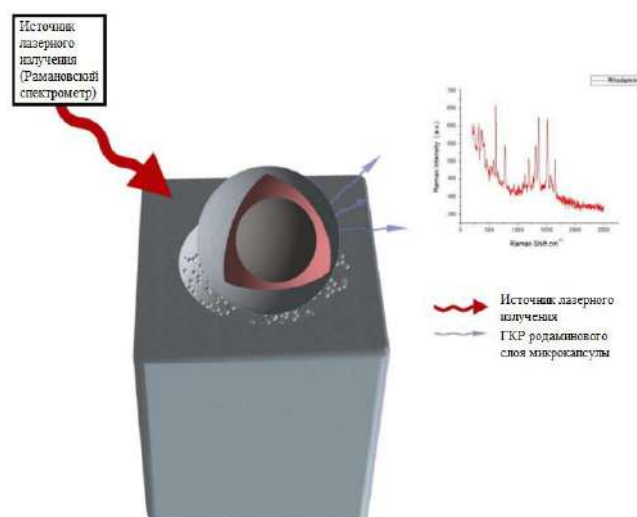


Рис. 2. Модель проведения эксперимента

В перспективе полученные результаты создадут новый подход к разработке нанодатчиков на основе плазмонных резонансных наноструктур для изучения процессов в примембранных областях живых органелл/клеток, позволят диагностировать патологии на ранних стадиях и тестировать лекарственные средства.

Работа выполнена при частичной поддержке Минобрнауки России (0714-2020-0002) и РФФИ (20-07-00475 и 18-29-02089).

Литература

1. Luo, Shyh-Chyang, et al. "Nanofabricated SERS-Active Substrates for Single-Molecule to Virus Detection in Vitro: A Review." *Biosensors and Bioelectronics*, vol. 61, 2014, pp. 232–240., doi:10.1016/j.bios.2014.05.013.
2. Ando, Jun, et al. "Dynamic SERS Imaging of Cellular Transport Pathways with Endocytosed Gold Nanoparticles." *Nano Letters*, vol. 11, no. 12, 2011, pp. 5344–5348., doi:10.1021/nl202877r.
3. Brazhe, Nadezda A., et al. "Probing Cytochrome c in Living Mitochondria with Surface-Enhanced Raman Spectroscopy." *Scientific Reports*, vol. 5, no. 1, 2015, doi:10.1038/srep13793.
4. Ushkov, Andrei A., et al. "Systematic Study of Resonant Transmission Effects in Visible Band Using Variable Depth Gratings." *Scientific Reports*, vol. 9, no. 1, 2019, doi:10.1038/s41598-019-51414-3.
5. Mokrousov, Maksim D., et al. "Amplification of Photoacoustic Effect in Bimodal Polymer Particles by Self-Quenching of Indocyanine Green." *Biomedical Optics Express*, vol. 10, no. 9, 2019, p. 4775., doi:10.1364/boe.10.004775.

УДК 539.2

Диффузионная динамика и образование кластеров в системах активной материи на основе ансамблей вращающихся роботов

**В.А. Порватов^{1,2}, А.Д. Розенблит³, Д.А. Петрова², Г.Ю. Гриценко⁴,
Д.С. Филонов¹, А. Суслов⁵, Н.А. Олехно³**

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Национальный исследовательский технологический институт "МИСиС"

³Национальный исследовательский университет ИТМО

⁴Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

⁵University of Bath, Bath

Исследование динамики активной материи представляет существенный интерес, поскольку такие системы демонстрируют сложную и богатую неравновесную динамику. Отличительной особенностью частиц таких систем является возможность каждой из них конвертировать внутренние запасы энергии в механическое движение, что порождает различные режимы самоорганизации. Системы активной материи реализуются с помощью различных платформ, от ансамблей бактерий [1]

до оптомеханических систем из микро- или нано-частиц [2]. Однако экспериментальное исследование подобных систем является очень сложной задачей. В то же время, реализация систем активной материи с помощью ансамблей макроскопических роботов является более доступной и хорошо зарекомендовала себя в ряде исследований [3,4].

Представленная работа посвящена экспериментальному исследованию динамики ансамблей из ускоренно вращающихся роботов, рис.1(а), каждый из которых взаимодействует с соседними роботами посредством трения боковых поверхностей. Ключевой особенностью работы является реализация различных значений трения боковой поверхности роботов, в отличие от предыдущих работ, в которых трение между роботами практически отсутствует [3-5]. Отдельный интерес представляет случай большого коэффициента трения, так как это позволяет эмулировать поведение оптомеханических и других микромасштабных систем активной материи. Последнее обусловлено тем, что с уменьшением размера активных частиц возрастает роль поверхностных эффектов, в том числе сил трения между ними. Одновременно нами исследуются различные режимы динамики системы в зависимости от плотности заполнения площади системы роботами.

Для проведения экспериментов нами была разработана и изготовлена установка, состоящая из 22 ускоренно вращающихся вокруг своей оси роботов (self-rotating particles, active rotors). Вращение роботов обеспечивается за счёт их постоянной вибрации и специальной асимметричной формы нижней части корпуса роботов, рис. 1(а). Конструкция роботов включает в себя вибромотор QX-6A-1, батарею питания с напряжением 3В, корпус, распечатанный на 3D принтере посредством технологии FDM, а также схему включения, состоящую из PIN-фотодиода Vishay BPW34, двух транзисторов КТ315В1, и переключателя S7-SS03-12D02, рис. 2(б). Схема управления обеспечивает одновременное включение и выключение роботов при изменении уровня окружающего освещения, регулируемого с помощью светодиодной ленты. Установка также включает границу изменяемой формы, видеокамеру и штатив, рис. 1(в). Для боковых поверхностей роботов были подобраны материалы с коэффициентами трения $k_0 = 0.26$ (пластиковый скотч), $k_1 = 0.40$ (малярная лента), $k_2 = 0.96$ (абразив).

Далее, была проведена серия экспериментов, в ходе которой исследовались зависимости среднеквадратичного отклонения роботов от начального положения как функции времени при фиксированном количестве роботов в системе, но с различными внешними диаметрами границы $D=20$ см (рис. 1(г)), $D=25$ см (рис.1(д)), и $D=30$ см (рис.1(е)). При каждом значении плотности заполнения исследовались три варианта системы с различным значением коэффициента трения боковой поверхности роботов (различные цвета на рис. 1(г)-(е)).

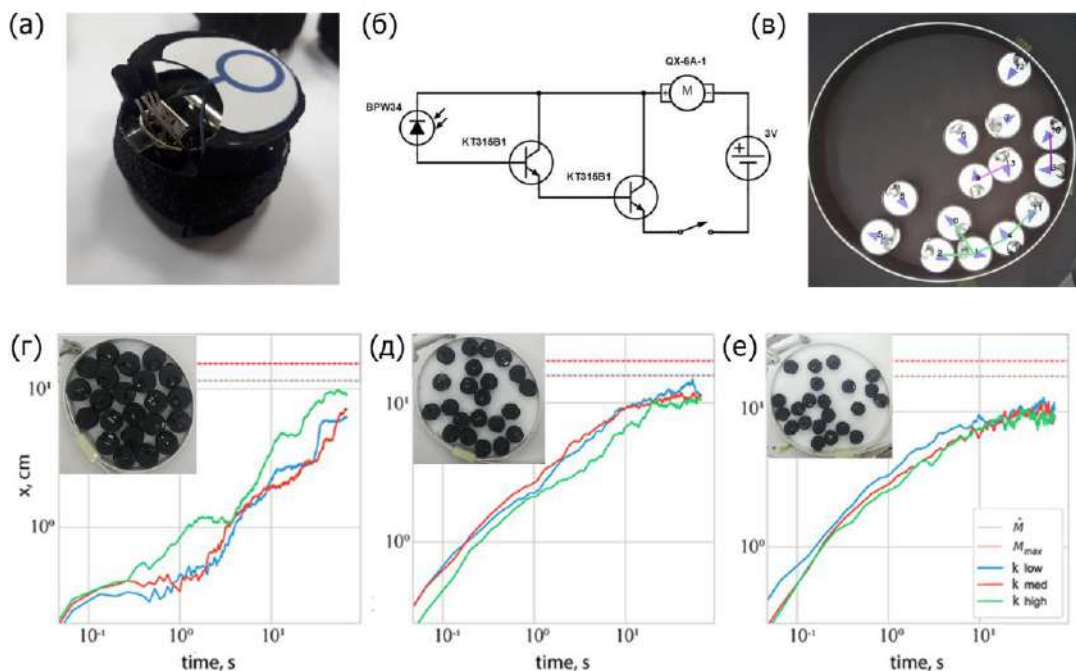


Рис. 1. (а) Фотография робота, вращающегося вокруг своей оси за счёт вибрации. (б) Электрическая схема платы управления, встроенной в каждого робота. (v) Фотография установки во время проведения измерений. На рисунке показан результат работы программы обработки на основе

библиотеки OPEN CV, определяющей параметры движения отдельных роботов, а также обозначающей кластеры из нескольких роботов (выделены различными цветами). (г)-(е) Графики зависимости среднеквадратичного отклонения робота от начального положения как функции времени, усреднённые по всем роботам в системе, а также по трём реализациям системы для каждой кривой. Внешний диаметр системы составляет: (г) 20 см; (д) 25 см; (е) 30 см. Разным цветом обозначены различные значения коэффициента трения боковой поверхности роботов. На вставках показаны фотографии соответствующих систем во время проведения измерений.

Полученные результаты показывают, что при низких плотностях заполнения системы динамика роботов носит диффузионный характер, в то время как при больших плотностях система может приобретать макроскопическую упругость, и отдельные роботы только незначительно колеблются возле фиксированных положений (такой фазовый переход называется jamming transition). Интересно, что наблюдается немонотонная зависимость динамики системы от коэффициента трения между роботами: при низких плотностях заполнения системы подвижность роботов выше при низком трении, рис. 1(д,е), в то время как при больших плотностях, наоборот, jamming transition менее выражен при большем коэффициенте трения, и подвижность роботов при этом больше, чем при низком трении, рис. 1(г). Причиной такого поведения могут являться различные механизмы, определяющие устойчивость кластеров в зависимости от степени проскальзывания частиц при их взаимодействии. Наличие подобных немонотонностей подчёркивает важность исследования влияния трения на динамику активных систем.

Литература

1. *Mathijssen A.J.T.M et al.* Nutrient Transport Driven by Microbial Active Carpets // *Phys. Rev. Lett.* 2018 121 248101
2. *Ross T. et al.* Controlling organization and forces in active matter through optically defined boundaries // *Nature* 2019 572 224
3. *Slavkov I et al.* Morphogenesis in robot swarms // *Sci. Robot.* 2018 3 eaau9178
4. *Deblais A. et al.* Boundaries control collective dynamics of inertial self-propelled robots // *Phys. Rev. Lett.* 2018 120 188002
5. *Ravazzano L. et al.* Unjamming of active rotators // *Soft Matter* 2020 16 5478

УДК 533.922

Затухание плазмонов в электронно-открытых системах

К.Н. Капралов, Д.А. Свинцов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Долгое время считалось, что основным механизмом затухания плазмонов в металлах и полупроводниках является релаксация электронного импульса и радиационное затухание. Однако в полупроводниковых структурах, соединенных с контактами, неравновесные электроны, осциллирующие в плазменной волне, могут проникать вглубь контактов с дальнейшей термализацией (рис. 1) [1]. Данный процесс также может давать вклад в затухание плазмонов. Впервые это явление было обнаружено при численном моделировании распространения плазмонов в полевых транзисторах конечного размера [2]. В данной работе построена аналитическая модель «контактного» затухания плазмонов для электронных систем различных размерностей.

Мы рассчитываем время жизни плазмона в баллистической электронной системе конечной длины с контактами стока, истока и затвора. Модель основана на решении уравнения Больцмана в неоднородном электрическом поле плазменной волны. Уравнение было дополнено граничными условиями частичного отражения электронов на контактах. Учет самосогласованного поля позволяет получить интегральное уравнение для определения собственных частот плазмонов с учетом контактных эффектов. Решение этого уравнения проводилось по теории возмущений. Малым параметром является отношение периода колебаний плазменной волны ко времени прохождения канала электроном.

Было обнаружено, что для баллистической (бесстолкновительной) электронной системы контактный вклад в затухание плазмона имеет порядок времени пролета канала электроном, умноженной на вероятность проникновения электрона в контакт. В следующем порядке по скорости Ферми время жизни приобретает осциллирующий вклад, зависящий от отношения частоты волны и

полетной частоты (рис. 2). Также был рассчитан коэффициент отражения плазменной волны, падающей на контакт полупроводника и идеального металла. Оказалось, что при отражении поглощается доля энергии, пропорциональная вероятности проникновения электрона в контакт, умноженной на отношение скорости Ферми электрона к фазовой скорости волны.

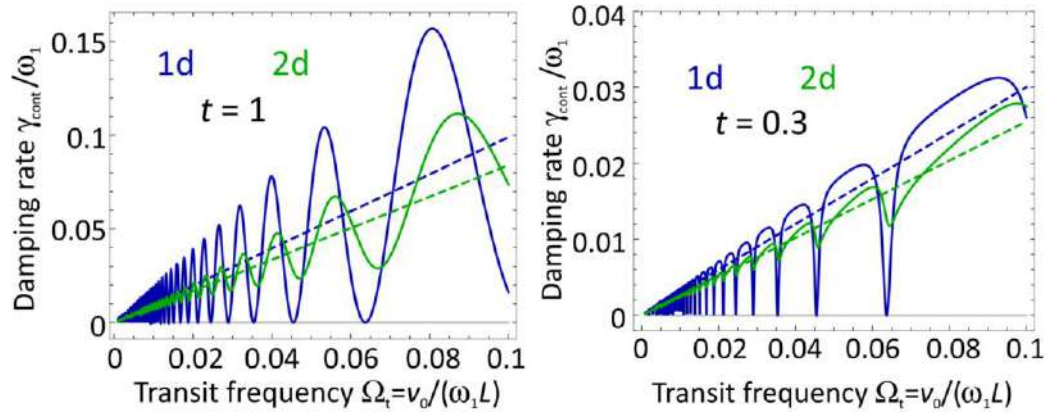


Рис. 2. Коэффициент затухания плазмонов, нормированный на собственную частоту плазмона ω_1 , в зависимости от частоты пролета электрона. Пунктирной линией показана линейная по скорости Ферми часть коэффициента затухания

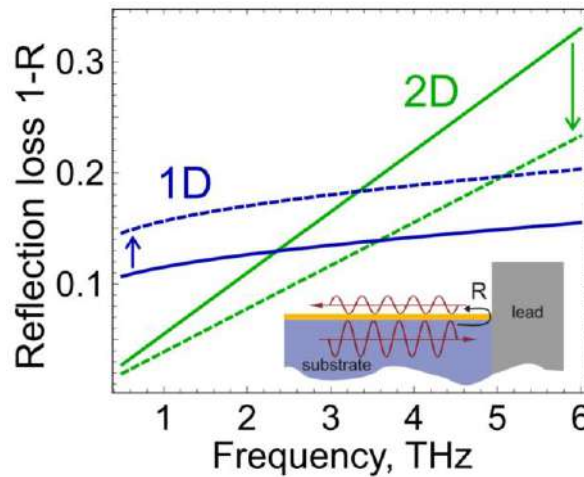


Рис. 3. Отражательные потери плазмонов при рассеянии на контакте в зависимости от частоты волны. Синим и зеленым показаны 1d (полупроводниковая нанотрубка) и 2d (квантовая яма GaAs) плазмоны соответственно. Сплошной линией показаны концентрации носителей $5 \times 10^5 \text{ см}^{-2}$ для 1d и $5 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ для 2d, пунктирной - более высокие концентрации 10^6 см^{-1} для 1d и 10^{12} см^{-2} для 2d. Радиус нанотрубки 5 нм, эффективная масса - 0.1 массы свободного электрона.

Полученные результаты указывают на фундаментальное ограничение размера плазмонных устройств: при уменьшении их размера контактное затухание будет более выраженным. Увеличение контактного сопротивления (например, путем создания барьеров Шоттки к баллистической системе) ослабляет эффект контактного затухания.

Литература

1. Kapralov K., Svintsov D. Plasmon damping in electronically open systems //arXiv preprint arXiv:2005.01680. – 2020.
2. Satou, A., Ryzhii, V., Mitin, V., & Vagidov, N. (2009). Damping of plasma waves in two-dimensional electron systems due to contacts. *physica status solidi (b)*, 246(9), 2146-2149

Динамика доменной стенки в ферромагнетиках под воздействием спинового тока вблизи точки компенсации момента импульса

В.В. Юрлов¹, К.А. Звездин^{1,2}, А.К. Звездин^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Институт общей физики имени А.М. Прохорова РАН

Рассмотрена динамика доменной стенки в ферромагнетиках, на примере GdFeCo, под влиянием спин-поляризованного тока вблизи точки компенсации момента импульса (angular momentum

$$\frac{M_1}{\gamma_1} = \frac{M_2}{\gamma_2}$$

compensation point), где γ_1 , γ_2 , M_i и γ_i намагниченность и гиромагнитное отношение для i -ой подрешетки соответственно ($i = 1, 2$). Для вывода динамических уравнений движения доменной стенки был использован лагранжиан, диссипативная функция Рэлея и плотность мощности спинового тока для двухподрешеточного ферромагнетика. Используя квазиантиферромагнитное приближение, переходим от полярных и азимутальных углов каждой из подрешеток к углам θ и φ между

квазиантиферромагнитным вектором $\mathbf{L} = \mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2$ и легкой осью ферромагнетика. Применяя процедуру описанную в [1] получаем эффективный лагранжиан, эффективную функцию Рэлея и эффективную плотность мощности спинового тока, используя которые решаем уравнения Эйлера-Ла-

гранжа $\frac{d}{dt} \left(\frac{dL_{eff}}{d\dot{q}} \right) - \frac{dL_{eff}}{dq} = - \frac{dR_{eff}}{dq} - \frac{dW}{dq}$, где $q = \theta, \varphi$. В результате получим систему уравнений, которые описывают динамику доменной стенки вблизи точки компенсации момента импульса:

$$\begin{cases} \frac{2\bar{\alpha}M}{\bar{\gamma}\Delta}V + m \frac{\dot{\varphi}}{\gamma_{eff}} = - \frac{\pi\bar{A}}{2} \sin(\varphi - \psi) n_{\square} \\ - \frac{\chi_{\perp}}{\gamma_{eff}^2} \ddot{\varphi} + \frac{m}{\gamma_{eff}} \frac{V}{\Delta} - K_{\perp} \sin 2\varphi - \frac{2\bar{\alpha}M}{\bar{\gamma}} \dot{\varphi} = - \bar{A} n_{\perp} + \frac{\chi_{\perp}}{2} \left(\frac{\bar{B}}{M} \right)^2 \sin 2(\varphi - \psi) n_{\square} \end{cases}, \quad (1)$$

где $m = (M_1 - M_2)/2$, $M = (M_1 + M_2)/2$, $\chi_{\perp} = M / H_{ex}$ магнитная восприимчивость, H_{ex} – обменное поле между подрешетками, $K_{\perp}$ константа плоскостной магнитной анизотропии, $\alpha_{eff} = \frac{\bar{\alpha}m}{m - m_0}$, $\gamma_{eff} = \frac{\bar{\gamma}m}{m - m_0}$, $\bar{\alpha} = \frac{\alpha_1}{\gamma_1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2}$, $\frac{1}{\bar{\gamma}} = \frac{1}{2\gamma_1} + \frac{1}{2\gamma_2}$, $m_0 = \frac{M(\gamma_1 - \gamma_2)}{\gamma_1 + \gamma_2}$, $\bar{A} = \frac{\hbar J P_{\perp}}{2eL}$ и

$\bar{B} = \frac{\hbar J P_{\square}}{2eL}$ – компоненты Слончевский (Slonchewski) и “field-like” спинового тока соответственно,

J – плотность тока, e – заряд электрона, L – толщина ферромагнитного слоя, $P_{\perp}$ и $P_{\square}$ – величины поляризации спинового тока, α_i – параметр затухания Гильберта для i -ой подрешетки, $n_{\perp}$ и $n_{\square}$ –

перпендикулярная и плоскостная компоненты единичного вектора $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$, сонаправленного с вектором поляризации спинового тока, ψ – угол между проекцией вектора $\mathbf{n}$ на плоскость x - y и осью x , Δ – толщина доменной стенки, V – скорость доменной стенки.

Анализ уравнений динамики доменной стенки (1) в случае плоскостной поляризации спинового тока ($n_{\square} = 1$) показывает, что эффективная подвижность (mobility) доменной стенки $\frac{V}{J}$

достигает максимума вблизи точки компенсации момента импульса и равна $\frac{V}{J} = \frac{\pi \Delta \bar{\gamma} \hbar P_{\perp}}{4eL\bar{\alpha}M}$. В случае, когда поляризация спинового тока перпендикулярна поверхности образца ($n_{\perp} = 1$), динамика доменной стенки возбуждается Слончевский компонентой момента спинового тока. Решение динамических уравнений (1) в нестационарном режиме, когда $\dot{\phi} \neq 0$, описывается формулой

$$\tan \varphi = \frac{J^*}{J} + \sqrt{1 - \left(\frac{J^*}{J}\right)^2} \tan(\omega_0 t - \varphi_0) \quad J^* = \frac{4\pi m^2 e L}{\hbar P_{\perp}}$$

, где J^* – критический ток, ω_0 – частота прецессии квазиантиферромагнитного вектора,

$$\varphi_0 = \tan^{-1} \frac{J^*}{\sqrt{J^2 - J^{*2}}}$$

На Рис. 1 продемонстрирована зависимость критического тока от температуры и средней скорости доменной стенки от тока. В отличие от динамики доменной стенки в присутствии внешнего магнитного поля [2], в стационарном режиме скорость доменной стенки равна нулю и антиферромагнитный вектор замерзает, причем

$$\sin 2\varphi = \frac{J}{J^*}$$

азимутальный угол удовлетворяет выражению $\sin 2\varphi = \frac{J}{J^*}$. В нестационарном режиме скорость доменной стенки по модулю возрастает с током, но в точке компенсации момента импульса обращается в ноль. Отметим, что квазиантиферромагнитный вектор в нестационарном режиме осциллирует с гигагерцовой частотой при токах порядка 10^7 A/cm^2

Работа выполнена при поддержке РНФ 17-12-01333.

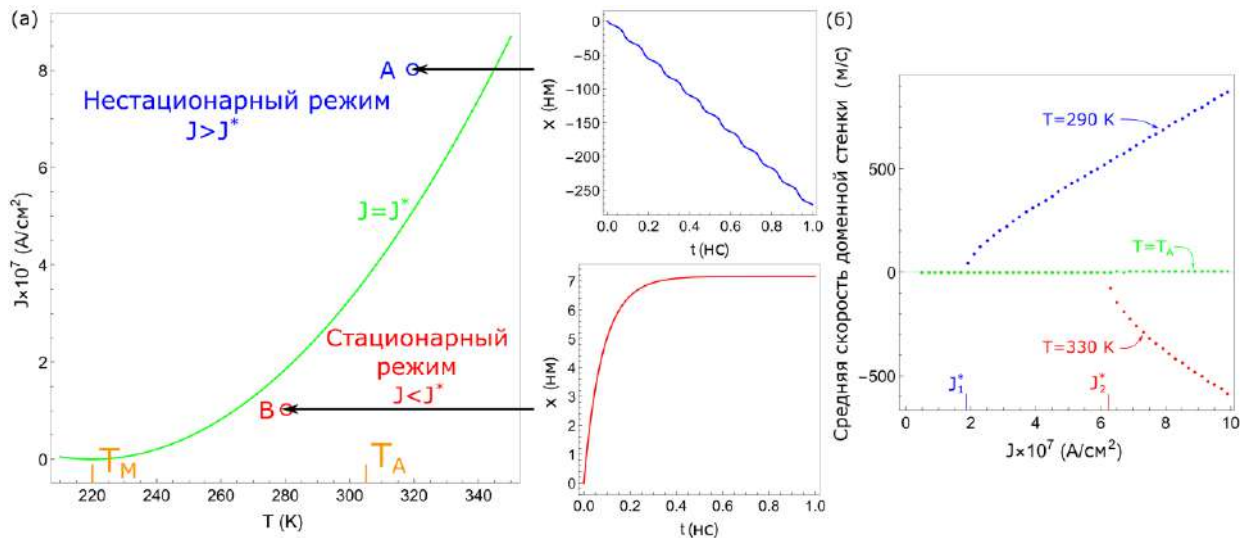


Рис. 1. а) Зависимость критической плотности тока от температуры, вставки А и В показывают зависимость координаты доменной стенки от времени; б) Зависимость средней скорости доменной стенки от плотности тока

Литература

1. Davydova M.D., Zvezdin K.A., Kimel A.V., Zvezdin A.K. Ultrafast spin dynamics in ferrimagnets with compensation point // Journal of Physics: Condensed Matter 2019. V. 32. P. 01LT01.
2. A.K. Zvezdin, Z.V. Gareeva, K.A. Zvezdin Anomalies in the dynamics of ferrimagnets near the angular momentum compensation point // Journal of Magnetism and Magnetic Materials 2020. V. 36. P. 166876.

УДК 537.876, 535.012.22

Излучение и распространение электромагнитных волн в двухосных кристаллах

К.В. Воронин¹, В.С. Волков¹, А.Ю. Никитин^{1,2}

Анизотропные среды были предметом фундаментальных и прикладных исследований в оптике на протяжении нескольких столетий. В последние десятилетия научный интерес к анизотропным оптическим явлениям резко возрос в связи с разработкой и изготовлением новых искусственных материалов (метаматериалов) с индивидуализированным оптическим откликом. Яркими примерами которых являются фотонные и плазмонные кристаллы [1] и метаповерхности [2], демонстрирующие впечатляющие явления, такие как отрицательное преломление [3], суперлинзирование [4] и другие.

С теоретической точки зрения, в объемных одноосных кристаллах (таких как h-BN, SiC или слоистых метаматериалах), характеризующихся двумя показателями преломления, собственные электромагнитные моды представляют собой обыкновенные и необыкновенные волны. Во многих случаях распространение света по границам одноосных кристаллов и внутри пластин можно прямо проанализировать аналитически [5]. В отличие от одноосных, двухосные кристаллы характеризуются тремя показателями преломления, и обе собственные электромагнитные моды не являются обыкновенными. В результате понимание и аналитическое рассмотрение электромагнитных явлений в двухосных средах значительно сложнее, чем в одноосном случае. И до сих пор исследования электромагнитных мод в двухосных пластинах были в основном предметом численного анализа [6].

В данной работе представлен подробный вывод закона дисперсии электромагнитных мод в двухосном слое конечной толщины (с произвольным тензором диэлектрической проницаемости), окруженном двумя полубесконечными изотропными средами с произвольной диэлектрической проницаемостью. В докладе будет представлено, как свести общее дисперсионное соотношение к простым аналитическим выражениям для коротковолновых мод и малой толщины пластин, которые в настоящее время представляют большой интерес для исследования анизотропных поляритонов. Достоверность аналитических приближений продемонстрирована сравнением с численным моделированием методом конечных элементов.

Для изучения возбуждения поляритонов, в работе представлен вывод функции Грина. Чтобы вычислить распределение электрического поля, создаваемого некоторым источником, таким как диск или стержневые антенны, как правило, нам необходимо решить неоднородное линейное дифференциальное уравнение имеющее вид

$$\hat{L}f = f_0 \quad (1)$$

где $\hat{L}$ – линейный дифференциальный оператор, f_0 – функция описывающая действие источника, а f – переменная, представляющая электрическое поле, которую нужно вычислить. Чтобы решить это неоднородное уравнение, мы можем использовать формализм функций Грина. Сначала мы вычисляем функцию Грина $G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ для линейного дифференциального оператора и получаем распределение электрического поля как свертку этой функции с начальным полем:

$$f(\mathbf{r}) = \iiint d^3\mathbf{r}' G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') f_0(\mathbf{r}') \quad (2)$$

Напомним, что физический смысл функции Грина — это поле, создаваемое в точке с радиус-вектором $\mathbf{r}$ точечным источником, помещенным в точку $\mathbf{r}'$. Функция Грина также связана с локальной плотностью электромагнитных состояний (LDOS). С помощью полученной функции Грина, общее электрическое поле поляритонов, излучаемое поверхностью антенны и распространяющееся вдоль пленки, может быть рассчитано в соответствии с интегральным уравнением Липпмана-Швингера [7]:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = k_0^2 \int d^3\mathbf{r}' \hat{G}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \mathbf{E}_0(\mathbf{r}'), \quad (3)$$

где $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ – поле, создаваемое источником в точке $\mathbf{r}$, $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}')$ – начальное поле (на поверхности источника), $k_0 = \omega/c$ – волновой вектор в вакууме, ω – угловая частота волн, а c – скорость света. Поскольку мы везде рассматриваем только z-компоненты электрических полей, нам нужна только zz-компонента DGF.

Таким образом, было произведено подробное исследование распространения электромагнитных мод в двухосном кристалле, описаны собственные моды, получены функции Грина, все аналитические приближения проверены с помощью численного моделирования. Все эффекты, характерные для двухосных кристаллов были продемонстрированы на примере α -MoO₃, рис. 1.

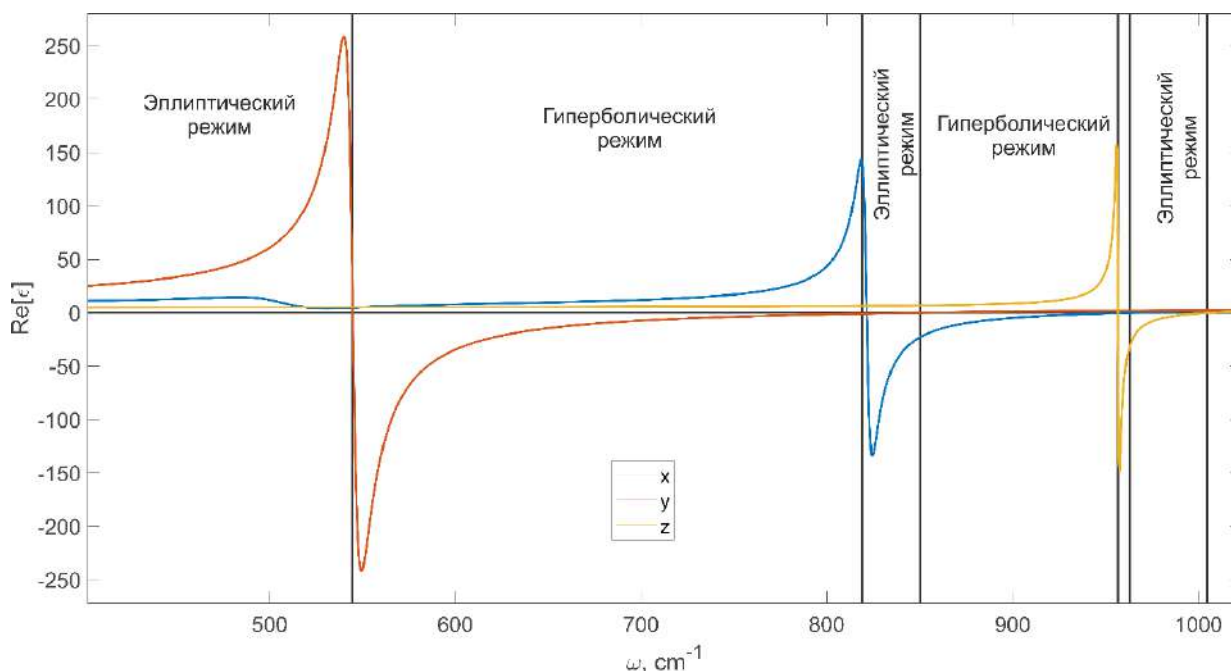


Рис. 1. Действительная часть главных компонент тензора диэлектрической проницаемости α - MoO_3 в зависимости от частоты. На графике отмечены диапазоны частот, характеризующиеся разными типами собственных мод пленки.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России (0714-2020-0002).

Литература

1. J. B. Pendry, L. Martín-Moreno, F. J. García-Vidal. Mimicking surface plasmons with structured surfaces // Science 2004. V. 305. P. 847.
2. N. Yu, F. Capasso. Flat optics with designer metasurfaces // Nat. Mater. 2014. V. 13. P. 139.
3. E. Cubukcu, K. Aydin, E. Ozbay, S. Foteinopoulou, C. M. Soukoulis. Negative refraction by photonic crystals // Nature 2003. V. 423. P. 604.
4. J. B. Pendry. Negative Refraction Makes a Perfect Lens // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85. P. 3966.
5. M. I. D'yakonov. New type of electromagnetic wave propagating at an interface // Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1988. V. 94. P. 119.
6. T. Maldonado, T. Gaylord. Hybrid guided modes in biaxial planar waveguides // J. Lightwave Technol. 1966. V. 14. P. 486.
7. Novotny. Principles of Nanooptics. // Cambridge University Press 2006.

УДК 535.343.9

Изучение переключаемых оптических и структурных свойств пленок VO_2

И.К. Домарацкий¹, С.С. Жуков¹, А.С. Славич¹, М.Е. Кутенов², Е.М. Кайдашев², В.Е. Кайдашев¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Южный федеральный университет

Диоксид ванадия VO_2 интенсивно исследуется из-за его способности к сверхбыстрому (~26-100 фс) переключению электрических свойств от полупроводника до металла [1], при котором проводимость изменяется более чем на четыре порядка [2]. Быстрое изменение электронной структуры, а также структурный фазовый переход в VO_2 может происходить под действием нагрева выше ~68°C [3], под действием сильных электрических полей [4], в том числе наведённых облучением интенсивным лазерным излучением УФ/видимого или ближнего ИК диапазона [1,5,6], а также при протекании тока за счет выделения джоулева тепла [7]. Кроме того, емкость тонкой пленки из VO_2 также изменяется под действием высокого электрического поля [8]. Переключение электрических свойств от “изолятора” к металлу приводит к существенному изменению свойств пропускания/от-

ражения излучения в широком диапазоне ближнего ИК/среднем ИК, а также в ТГц/суб-ТГц диапазонах, что делает VO_2 перспективными для электрически/оптически управляемых ТГц модуляторов/фильтров, зеркал для ТГц “имеджинга”, перестраиваемых метаповерхностей для фокусировки и отклонения ТГц луча и других приложений.

Нами изучены свойства отражения/пропускания эпитаксиальных пленок VO_2 в ближнем ИК/среднем ИК/ТГц/суб-ТГц диапазонах, переключаемые при нагреве (Рис.1). Методом спектроскопии комбинационного рассеяния изучен фазовый структурный переход в пленках VO_2 происходящий как при нагреве, так и при облучении интенсивным лазерным излучением. Установлены пороги оптического переключения структурных и электрических свойств пленок при облучении лазерным излучением различных длин волн ближнего ИК/видимого и УФ диапазонов.

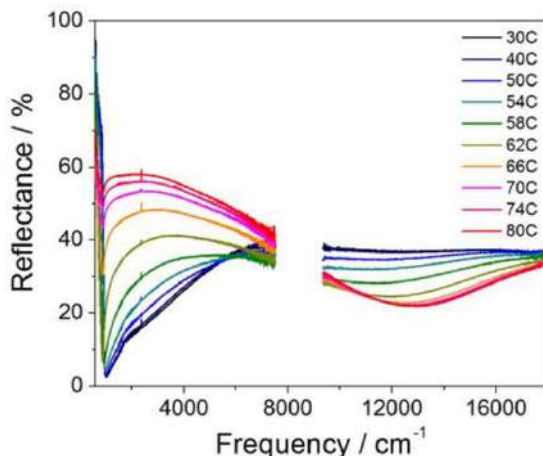


Рис.1. Переключение свойств отражения излучения ближнего ИК/среднего и дальнего ИК диапазонов при фазовом переходе полупроводник-металл в пленке VO_2 .

Изготовление эпитаксиальных пленок VO_2 выполнено при поддержке гранта Южного Федерального университета № 07/2020-06-ММ. Изучение свойств пленок VO_2 проводилось при финансовой поддержке проекта РФФИ №18-02-00151А.

Литература

1. *Cavalleri A et.al.*, Evidence for a structurally-driven insulator-to-metal transition in VO_2 : A view from the ultrafast timescale *Phys. Rev. B* 70 (2004) 16
2. *Borek M et.al.*, Pulsed laser deposition of oriented VO_2 thin films on R-cut sapphire substrates *Appl. Phys. Lett.* 63 (1993) 24
3. *Lei D Y et.al.*, Optically-Triggered Nanoscale Memory Effect in a Hybrid Plasmonic-Phase Changing Nanostructure, *ACS Photonics* 2 (2015) 1306
4. *Qazilbash M M et.al.*, Electrostatic modification of infrared response in gated structures based on VO_2 *Appl. Phys. Lett.* 92 (2008) 241906
5. *Wu J M et.al.*, Ultrahigh responsivity and external quantum efficiency of an ultraviolet-light photodetector based on a single VO_2 microwire *ACS Appl. Mater. Interfaces* 16 (2014) 14286
6. *He Q et.al.*, Tunable/Reconfigurable Metasurfaces: Physics and Applications *AAAS Research* 2019 1849272
7. *Nouman M T et.al.*, Vanadium dioxide based frequency tunable metasurface filters for realizing reconfigurable terahertz optical phase and polarization control, *Opt. Express* 26, (2018) 12922
8. *Aliev V S et.al.*, Anomalous large electrical capacitance of planar microstructures with vanadium dioxide films near the insulator-metal phase transition *Appl. Phys. Lett.* 104 (2014) 13

УДК 535-15

ИК-детектор на основе гетероструктуры кремний/квантовые точки Ag_2S

С.С. Святых¹, И.В. Третьяков²

¹Московский педагогический государственный университет

²Астрономический центр физического института им. П.Н.Лебедева РАН

Проблема создания квантовых детекторов в ближнем и среднем инфракрасных диапазонах, совместимых с уже имеющейся CMOS-технологией, является до сих пор не решенной. Использование чистого кремния в этом диапазоне невозможно, в силу того, что запрещенная зона кремния приблизительно равно 1.1 eV и, следовательно, он прозрачен в данных диапазонах, а его альтернативы – полупроводники III-V групп весьма дорогостоящи [1]. В своей работе, мы предлагаем использование коллоидных растворов квантовых точек Ag₂S, нанесенных на кремниевый образец. Данный метод является дешевым, простым и что очень важно, полностью совместимым с современной CMOS-технологией.

Наша работа состояла из трех основных этапов – получение коллоидного раствора квантовых точек Ag₂S, изготовление кремниевых образцов, с последующим нанесением квантовых точек и оптические измерения. В силу того, что наша группа сама не изготавливала квантовые точки, а получала их вместе с измерением спектров поглощения и размерной гистограммой, начнем с описания технологического процесса получения кремниевых образцов, результаты представлены на рис.1(а).

В первом этапе методом фотолитографии и ионно-лучевого напыления, получали кремниевые образцы, состоящие из двух золотых контактов и кремниевого мостика между ними. Далее часть образцов откладывалась, для того чтобы использовать их потом как референсы, а на остальные методом центрифугирования, осаждалась тонкая пленка коллоида квантовых точек. Оптическое изображение конечной структуры представлено на рис.1(б).

Далее полученные образцы устанавливались на кремниевую линзу, для согласования излучения с детектором и промерялись оптически. Первая характеристика, которую мы измеряли – вольт-ваттная чувствительность ИК-детектора, измерения проводились на двух длинах волн 1.31 и 1.55 мкм – обе прозрачны для кремния, результаты представлены на рис.1 (в). Используя данные результаты, мы также вычисляли шумовую характеристику детектора – NEP (1).

$$NEP = \frac{V_n}{V_s} \frac{P}{\sqrt{\Delta f}}, \frac{W}{\sqrt{Hz}}, \quad (1)$$

где - V_n – шум детектора, V_s – сигнал снимаемый с детектора, P – мощность излучения, Δf – полоса модуляции. На следующей стадии, мы проводили спектральные измерения наших детекторов – измерение вольт-ваттной чувствительности, в зависимости от длины волны, для этого мы использовали амплитудно-модулированное излучение, выводимое из монохроматора, сигнал снимался с синхронного умножителя SR-830. Результаты измерений приведены на рис. 1 (г).

В результате наших измерений, мы получили следующий результат – имеется зависимость сигнала от размеров квантовых точек – чем больше квантовые точки, тем дальше протягивается ‘хвост’ в инфракрасный диапазон. Данные результаты согласуются с фактом роста ширины запрещенной зоны, с уменьшением размера квантовой точки. Итоговый NEP наших устройств равнялся $NEP_{Si} = 2.1e - 8 \frac{W}{\sqrt{Hz}}$ и $NEP_{Si\_Ag_2S} = 4.5e - 10 \frac{W}{\sqrt{Hz}}$ на длине волны 1,55 мкм.

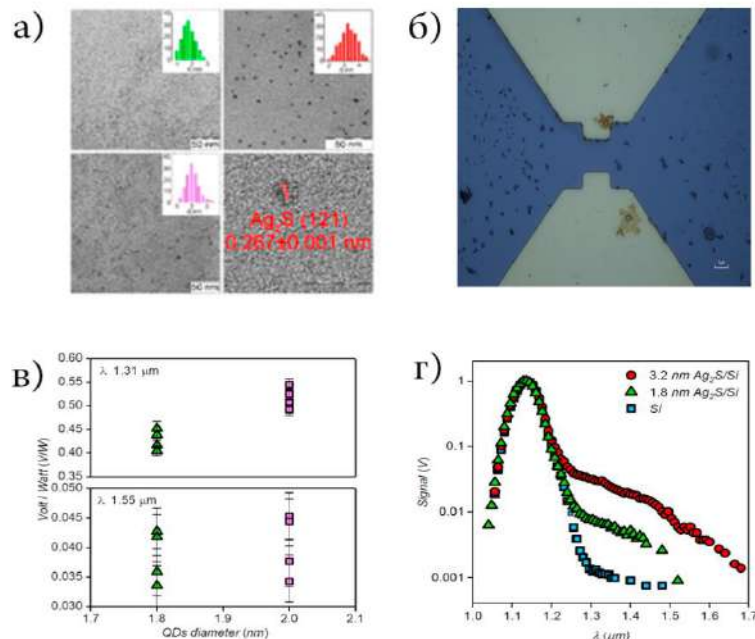


Рис. 1. а) Размерная гистограмма, полученная из анализа изображения полученного на ТЕМ. б) Оптическое изображение кремниевых образцов, с нанесёнными на них квантовыми точками, размеры кремниевого мостика 10x10 мкм. в) Вольт-ваттные чувствительности изучаемых детекторов, различные точки представляют различные образцы из партии. г) Спектральные измерения образцов, с различным диаметром квантовых точек и референсного кремниевого образца без квантовых точек. Сигнал отнормирован на 1 в максимуме поглощения кремния.

Литература

1. Jalali B., Fathpour S. Silicon photonics // *Journal of lightwave technology*. – 2006. – Т. 24. – №. 12. – С. 4600-4615.

УДК 538.958

Инфракрасная спектроскопия тонких плёнок искусственного эумеланина

З.В. Бедрень¹, И.О. Тюренков¹, С.С. Жуков¹, П.А. Абрамов¹, А.Б. Мостерт², К.А. Мотовилов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Department of Chemistry, Swansea University

Эумеланин является основным пигментом кожного и волосяного покров позвоночных и ряда других животных. Помимо внешней защиты от ионизирующего излучения данный полимер играет важную роль в обменных процессах с участием ионов железа и других металлов [1–3].

Эумеланин привлекает интерес исследователей не только в качестве участника различных биологических процессов, но и как компонента биоэлектронных устройств. Это связано с тем, что, будучи биосовместимым и биodeградируемым материалом, он одновременно обладает и довольно высокой протонной проводимостью [4,5]. Такое сочетание свойств уже сейчас позволяет изготавливать на его основе съедобные элементы питания [6], суперконденсаторы [7], органические электрохимические транзисторы [8].

С химической точки зрения эумеланин является сопряженным полимером, состоящим из продуктов частичного восстановления и таутомеризации индол-5,6-хинона (рис.1).

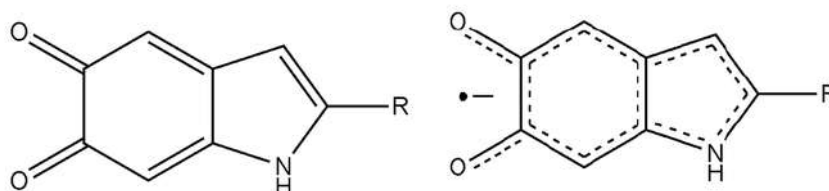


Рис. 1. Мономеры меланина. Слева индол-5,6-хинон, справа – семихинон-радикал. В качестве радикала R может выступать либо водород H, либо карбоксильная группа – COOH.

Уровень гидратации является основным фактором, определяющим транспортные свойства эумеланина при комнатной температуре: в постоянном поле проводимость изменяется приблизительно на 8 порядков величины при изменении массовой доли воды в материале от 0 до 21% [9]. Несмотря на то, что физико-химические особенности взаимодействия звеньев меланина с водой исследуются уже более 20 лет [1] научного консенсуса в этой области нет. В последние 8 лет доминирующим является представление о том, что основным источником протонов в меланине является реакция пропорционирования окисленной и восстановленной форм индол-хинона с образованием семихинона [9]. Однако, последовательная генерация этой формы мономера при гидратации материала не была тщательно исследована независимыми методами. Кроме того, открытым является вопрос об организации сети водородных связей в зависимости от концентрации воды в эумеланине. Последнее имеет прямое отношение к эффективности осуществляемого в материале протонного транспорта.

Инфракрасная спектроскопия в диапазоне частот от 1000 см⁻¹ до 8000 см⁻¹ является весьма информативным методом исследования водяных структур различной степени упорядочения. Действительно, обладая сравнительно большим дипольным моментом (порядка 1.85 Дебая) молекула воды сильно взаимодействует со сканирующим электромагнитным полем. Ввиду геометрии моле-

кулы воды, в спектрах пропускания параами воды электромагнитного излучения в среднем инфракрасном диапазоне можно наблюдать три интенсивные линии поглощения, связанные с внутримолекулярными колебаниями H_2O с частотами 1594 см^{-1} , 3656 см^{-1} и 3755 см^{-1} . Электрический отклик данных возбуждений носит анизотропный характер, позволяющий в случае наличия в исследуемом образце сильно упорядоченной подрешётки молекул H_2O определить пространственную ориентацию молекул воды [10]. Помимо этого, как показано в работе [11] в случае образования слабых химических связей молекулой воды с окружением частоты её внутримолекулярных колебаний испытывают сдвиг, позволяющий косвенно судить о силе этой связи.

В данной работе исследовались образцы искусственного эумеланина приготовленные в виде тонких плёнок на подложках из CaF_2 с помощью метода прямого испарения водяной суспензии меланина. Характеризация образцов проводилась на инфракрасном фурье спектрометре Bruker v80 с помощью микроскопа Hyperion 2000. В процессе эксперимента составлялись карты спектров поглощения электромагнитного излучения исследуемым объектом с целью выяснения однородности полученной плёнки по толщине, а также однородности плёнки по степени локальной гидратации.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-73-10154).

Литература

1. Riley P.A. Melanin//The International Journal of Biochemistry & Cell Biology, 1997, Vol. 29, No. 11, P. 1235-1239.
2. McGinness J.E. Mobility Gaps: A Mechanism for Band Gaps in Melanins//Science, 1972, Vol. 177, No. 4052, P. 896-897.
3. Bridelli M., Capelletti R., Crippa P.R. Electret state and hydrated structure of melanin//Bioelectrochemistry and Bioenergetics, 1981, Vol. 8, No. 5, P. 555-567.
4. Bernardus Mostert A., Powell B.J., Gentle I.R., Meredith P. On the origin of electrical conductivity in the bioelectronic material melanin//Applied Physics Letters, 2012, T. 100, N 9, C. 093701.
5. Baraldi P., Capelletti R., Crippa P.R., Romeo N. Electrical Characteristics and Electret Behavior of Melanin//Journal of The Electrochemical Society, 1979, Vol. 126, No. 7, P. 1207.
6. Kim Y.J., Wu W., Chun S.-E., Whitacre J.F., Bettinger C.J. Biologically derived melanin electrodes in aqueous sodium-ion energy storage devices//Proceedings of the National Academy of Sciences, 2013, Vol. 110, No. 52, P. 20912-20917.
7. Kumar P., Mauro E.D., Zhang S., Pezzella A., Soavi F., Santato C., Cicoira F. Melanin-based flexible supercapacitors//Journal of Materials Chemistry C, 2016, Vol. 4, No. 40, P. 9516-9525.
8. Sheliakina M., Mostert A.B., Meredith P. An all-solid-state biocompatible ion-to-electron transducer for bioelectronics//Materials Horizons, 2018, Vol. 5, No. 2, P. 256-263.
9. Motovilov K.A., Grinenko V., Savinov M., Gagkaeva Z.V., Kadyrov L.S., Pronin A.A., Bedran Z.V., Zhukova E.S., Mostert A.B., Gorshunov B.P. Redox chemistry in the pigment eumelanin as a function of temperature using broadband dielectric spectroscopy//RSC Advances, 2019, T. 9, N 7, C. 3857-3867.
10. Shen Y.R., Ostroverkhov V. Sum-Frequency Vibrational Spectroscopy on Water Interfaces: Polar Orientation of Water Molecules at Interfaces//Chemical Reviews, 2006, Vol. 106, Sum-Frequency Vibrational Spectroscopy on Water Interfaces, No. 4, P. 1140-1154.
11. Kolesov B.A., Geiger C.A. Cordierite II: The role of CO_2 and H_2O //American Mineralogist, 2000, Vol. 85, Cordierite II, No. 9, P. 1265-1274.

УДК 53.015

Исследование зависимости параметров запрещенной зоны тонких пленок оксида цинка от технологии их нанесения

А.М. Гавриляк¹, М.В. Гавриляк^{1,2}, В.С. Лукашев¹, Ф.В. Подгорнов¹

¹Южно-Уральский государственный университет

²Институт электрофизики УрО РАН

Оксид цинка является полупроводниковым соединением, ширина запрещенной зоны которого равна $3,436\text{ эВ}$ [1]. Данный полупроводник обладает уникальными свойствами, такими как высокая энергия связи экситонов, прозрачность тонкопленочных структур и т.д. Благодаря этим свойствам ZnO является одним из самых перспективных и широко используемых материалов. Различные условия нанесения тонких пленок оксида цинка могут повлиять на изменение его оптических и

электрофизических свойств. Исследование влияния условий напыления тонких пленок оксида цинка на параметры ширины запрещенной зоны является целью настоящей работы.

Получение тонких пленок ZnO осуществлялось в два этапа: 1) нанесение цинка на подложку при двух разных температурах подложки (28 и 150 °C) с помощью метода электронно-лучевого напыления; 2) Окисление тонких пленок цинка в кислородной среде при температуре 300 °C в течение 8 часов с целью получения тонких пленок ZnO.

Пленки, нанесённые на подложки при разных температурах, обладают различной морфологией поверхности из-за возникших в них дефектов, механических напряжений и различной стехиометрии пленок, что может отразиться на значении ширины запрещенной зоны. Определить ширину запрещенной зоны можно, аппроксимируя линейную часть зависимости $(\alpha h\nu)^2$ от энергии $h\nu$, а затем экстраполируя ее до пересечения с осью абсцисс «рис. 1». Данная зависимость рассчитывается по формуле Тауца [2]:

$$(\alpha h\nu)^2 = \beta(h\nu - E_g), \quad (1)$$

где β – константа, называемая параметром затухания, независящая от энергии, E_g – ширина запрещенной зоны, $h\nu$ – энергия падающего фотона, α – коэффициент поглощения.

Значения ширины запрещенной зоны для пленки, нанесенной на холодную и нагретую подложки равны 3.075 эВ и 3.17 эВ. Таким образом, в настоящей работе выявлены различия параметров ширины запрещенной зоны для пленок, нанесенных при разных условиях методом электронно-лучевого напыления.

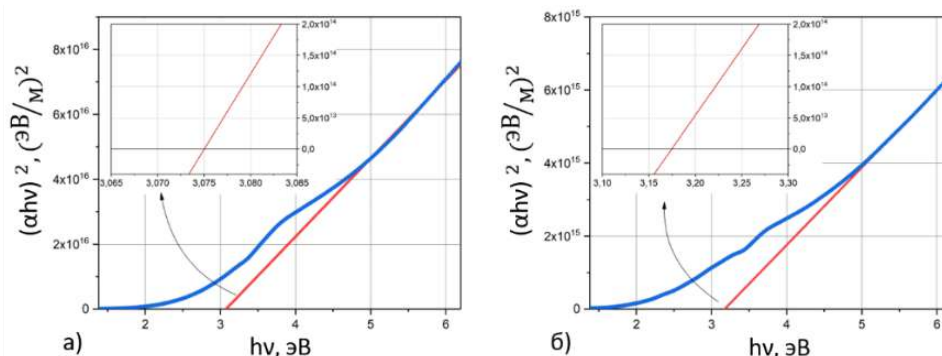


Рис.1. Зависимость $(\alpha h\nu)^2$ от энергии падающего фотона для пленок оксида цинка, нанесенных на подложку при температурах а) 28°C б) 150°C

Литература

1. Klingshirn C.F. et al. Zinc oxide. From fundamental properties towards novel applications. Springer Science & Business Media, 2010, V. 120. P. 359.
2. Hafdallah A., Djefailia F., Saidane N. Structural and Optical Properties of ZnO Thin Films Deposited by Pyrolysis Spray Method: Effect of Substrate Temperature //Optics. 2018. V. 7. P. 68.

УДК 537.635, 537.622.4

Исследование температурных зависимостей параметра затухания Гильберта в гетероструктурах ферромагнетик/топологический изолятор

А.С. Пахомов^{1,3}, К.А. Звездин^{1,2,3}, П.Н. Скирдков^{1,2,3}, А.И. Чернов^{1,3}

¹Московский физико-технический институт(национальный исследовательский университет)

²Институт общей физики РАН им. А.М. Прохорова

³Российский квантовый центр

Высокая величина спин-орбитального взаимодействия делает топологические изоляторы очень перспективным материалом для будущих спинтронных устройств. В нашей работе мы исследовали температурные зависимости параметра затухания Гильберта в гетероструктурах ферромагнетик/топологический изолятор. В качестве ферромагнетика был взят пермаллой $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$. Низкая магнитострикция и коэрцитивность делают его очень привлекательным материалом для использования в спинтронных устройствах. В качестве топологического изолятора был взят селенид висмута

Bi₂Se₃. Недавние работы демонстрируют, что именно этот топологический изолятор обладает рекордным значением спин-орбитального взаимодействия [1]. В этой работе измерялся S21 параметр, коэффициент прохождения электромагнитной волны через СВЧ тракт, в зависимости от величины внешнего магнитного поля. Данная зависимость характеризует динамику намагниченности в образце. Зависимость S21 параметра от внешнего поля описывается следующим выражением:

$$\frac{d(S21)}{dH} = y_0 + \frac{A[(H - H_r)\Delta H] + B[(H - H_r)^2 - \Delta H^2]}{[(H - H_r)^2 + \Delta H^2]^2} \quad (3)$$

где $H_r, \Delta H$ - резонансное поле и ширина резонансного пика соответственно, A, B, y_0 - коэффициенты аппроксимации. Параметр затухания Гильберта вычисляется из следующего выражения:

$$\Delta H = \Delta H_0 + \frac{4\pi\alpha f}{|\gamma|} \quad (4)$$

где ΔH_0 - фактор отвечающий за неомогенное уширение резонансного пика, α - параметр затухания Гильберта, γ - гиромагнитное отношение электрона, f - резонансная частота.

Было получено, что параметр затухания Гильберта для гетероструктуры пермаллой/топологический изолятор с толщиной пермаллой 20 нм и толщиной топологического изолятора 5 нм составляет 0.007 и 0.014 для температур 295К и 50К соответственно, что говорит о высокой конверсии спинового тока в зарядовый ток. Схожие значения параметра Гильберта были получены в работе [2], но для плёнок пермаллой толщиной 3 нм. В нашей работе значения параметра затухания Гильберта для гетероструктуры в заданном диапазоне температур превосходят в 2.5 раза величину для параметра для чистого пермаллой толщиной 20 нм. В работе [2] схожее явление объяснялось механизмом объёмного и поверхностного затухания. Там же для образца чистого пермаллой толщиной 20 нм параметр затухания Гильберта принимал значения приблизительно 0.006 для всего диапазона температур от 10К до 295К. Мы предполагаем, что наблюдаемое нами аномальное увеличение параметра Гильберта может быть связано со спин-орбитальным взаимодействием и спин-пампингом в слой топологического изолятора. Полученные результаты могут быть использованы для совершенствования элементной базы будущих спинтронных устройств.

Работа выполнена при поддержке РНФ (грант № 17-12-01333).

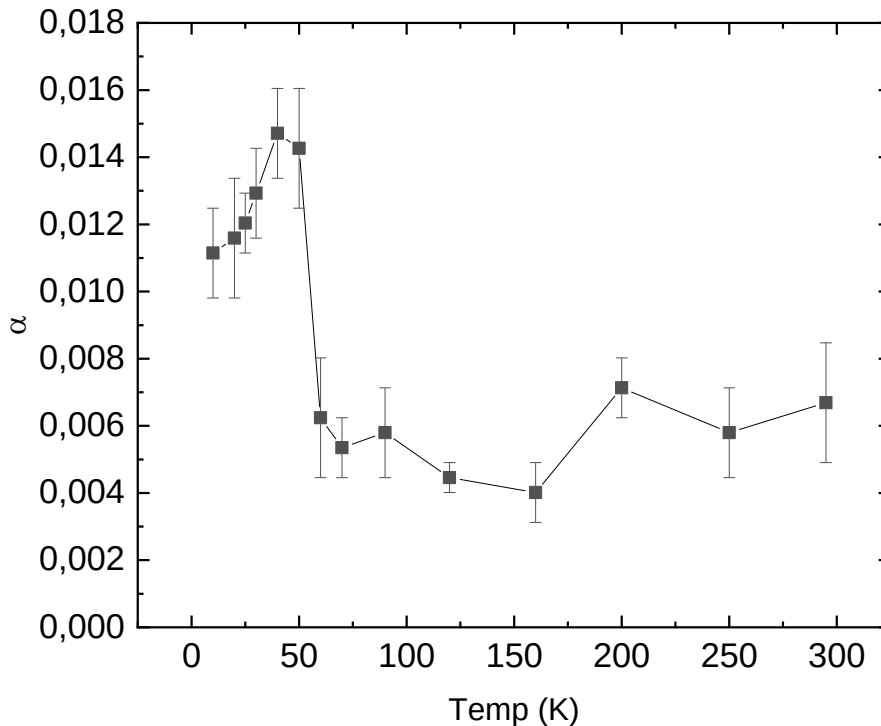


Рис. 2. Зависимость параметра затухания Гильберта от температуры для образца пермаллой (20нм)/топологический изолятор Bi₂Se₃ (5нм)

Литература

1. Mellnik A.R. et al. Spin-transfer torque generated by a topological insulator // Nature. 2014. V. 511. P. 449.
2. Yuelel Zhao et al. Experimental Investigation of Temperature-Dependent Gilbert Damping in Permalloy Thin Films // Sci Rep. 2016. V. 6.

УДК 537.9

Метод измерения поверхностного сопротивления ультратонких пленок золота

Ю.А. Клишин, Д.И. Якубовский, П. Мишра, Е.В. Кондратюк, Г.А. Ермолаев, М.С. Миронов, Ю.В. Стебунов, А.В. Арсенин, В.С. Волков

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Ультратонкие металлические пленки (толщиной менее 10 нм) представляют значительный интерес для применений в области нанофотоники и оптоэлектроники. Такие пленки могут быть использованы в качестве прозрачных и проводящих электродов [1], стать основой метаматериалов [2] и высокочувствительных фотодетекторов на основе двумерных материалов [3], а также представляют самостоятельный научный интерес для изучения квантово-размерных эффектов в квазидвумерных металлических пленках [4]. В работе предложен метод измерения электрического поверхностного сопротивления сплошных ультратонких пленок золота (3 - 10 нм), осажденных на тонкие монокристаллы дисульфида молибдена (MoS_2).

Ранее нами было продемонстрировано, что осажденные на монослой MoS_2 (полученные методом химического осаждения из газовой фазы) золотые пленки при толщинах менее 10 нм образуют сплошную структуру, в то время как на подложках SiO_2 образуются перколированные золотые пленки [5-7]. Это наглядно представлено на рисунке 1 (а).

В настоящей работе мы исследовали свойства ультратонких золотых пленок, осажденных методом электронно-лучевого испарения в высоком вакууме, на тонкие монокристаллы MoS_2 с латеральными размерами от 20 до 100 мкм. Толщина, шероховатость и однородность поверхности пленок изучены с помощью растрового электронного и атомно-силового микроскопов. Структурные свойства пленок значительным образом влияют на поверхностное сопротивление металлической пленки. В этой связи для точного определения поверхностного сопротивления ультратонких пленок разработана методика локального измерения сопротивления на масштабах около 100 мкм. Типичная схема измерений изображена на рисунке 1 (б).

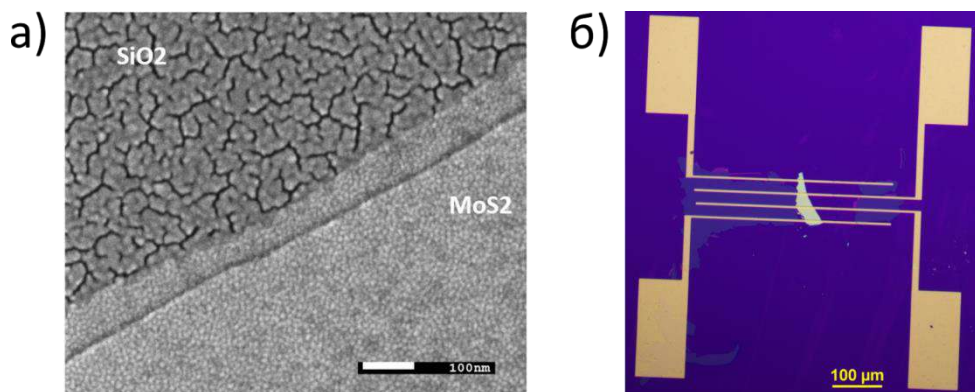


Рис. 1. (а) Пленка золота толщиной 10 нм на границе раздела MoS_2 и SiO_2 . (б) Типовая схема измерений поверхностного сопротивления с использованием четырех электродов.

Разработанный метод основан на технике переноса ультратонких пленок золота на заранее изготовленные методом оптической литографии золотые контакты, после чего осуществляется измерение вольт-амперных характеристик полученных структур с использованием зондовой. Изготовлены различные конфигурации контактов, позволяющие проводить измерения сопротивления разными методиками, позволяющими исключить сопротивление контактов. В докладе проведен анализ используемых методик и представлены результаты измерений для золотых пленок с толщинами от 3 до 10 нм.

Литература

1. Yun J. Ultrathin metal films for transparent electrodes of flexible optoelectronic devices // *Advanced Functional Materials*. 2017. V. 27. P. 1606641.
2. Lemasters R. Ultrathin wetting layer-free plasmonic gold films // *ACS Photonics*. 2019. V. 6 P. 2600.
3. Luhmann N. et al. Ultrathin 2 nm gold as impedance-matched absorber for infrared light // *Nature Communications*. 2020. V. 11. P. 2161.
4. Qian H. et al. Giant Kerr response of ultrathin gold films from quantum size effect // *Nature Communications*. 2016. V. 7. P. 13153.
5. Yakubovsky D. I. et al. Ultrathin and ultrasmooth gold films on monolayer MoS₂ // *Advanced Materials Interfaces*. 2019. V. 6. P. 1900196.
6. Volkov V.S. et al. Ultra-thin gold films: Towards 2D metals for photonic and optoelectronic applications // *Journal of Physics: Conference Series*. 2020. V. 1461. P. 012184.
7. Yakubovsky D.I. et al. Morphology and effective dielectric functions of ultra-thin gold films // *Journal of Physics: Conference Series*. 2018. V. 1092. P. 012167.
8. Yakubovsky D.I. et al. Near-field characterization of ultra-thin metal films // *Journal of Physics: Conference Series*. 2020. V. 1461. P. 012193.

УДК 537.874.6

Метод синтеза субволновых дифракционных элементов с адиабатически меняющейся глубиной

А.А. Ушков^{1,2}, А.А. Щербаков³, Изабель Верье², Томас Кампфе², Ив Журлан²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Университет Лиона, лаборатория Hubert Curien

³Университет ИТМО

Наноструктурированные поверхности играют важную роль в современных нанотехнологиях и фотонике. Планарные дифракционные элементы с толщиной, сравнимой с длиной волны падающего излучения, позволяют гибко настраивать и формировать ближнее и дальнее поле для нужд плазмоники [1], структурной генерации цвета [2], фотокатализа и оптических сенсоров [3]. Усовершенствованные схемы с меняющейся вдоль поверхности геометрией, например, чирпированные решетки, крайне интересны для миниатюрных мультифункциональных оптических устройств с перестраиваемым откликом. В данной работе предложен новый метод синтеза одномерных и двумерных дифракционных решеток с фиксированным периодом, но адиабатически меняющейся глубиной [2]. Созданные образцы с металлическим напылением позволяют менять амплитуду плазмонного резонансного пропускания путем выбора освещенного участка поверхности, и имеют богатый набор структурных цветов в зависимости от глубины решетки, угла падения света и его поляризации. Предложенный метод перспективен для применения в биосенсорах и систем эффективного возбуждения волноводов.

Принцип метода заключается в использовании слабой кривизны интерференционных полос от двух когерентных точечных источника света (см. Рис. 1а). Экспозиция светочувствительного материала (фоторезиста) дважды при небольшом (~мм) промежуточном сдвиге образца создает на его поверхности макроскопический муаровый узор, который после проявления в растворителе дает макроскопическое изменение глубины решетки вдоль поверхности. Разные направления сдвига образца (см. Рис. 1б-г) приводят к разным формам муаровых узоров, экспериментальные образцы показаны на Рис. 2.

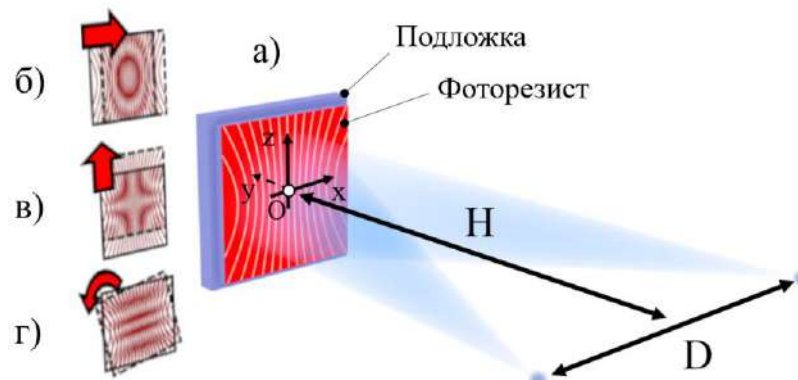


Рис. 1. (а) Облучение фоторезиста в поле двух точечных лазерных источников приводит к искривленным интерференционным полосам (белые линии на красном фоторезисте); расстояния D и H задают период решетки. (б)-(г) Иллюстрация разных муаровых форм при наложении двух семейств интерференционных полос.

Предложена теоретическая модель, чтобы вычислять точную форму муаровых узоров в зависимости от периода решетки, направления и величины сдвига. На Рис. 3 показаны измерения резонансного пропускания в видимом диапазоне в металлизированной решетке с периодом 300 нм, через участки с разной глубиной. Структурный цвет зависит от глубины участка решетки и поляризации света, см. Рис. 4а-б.

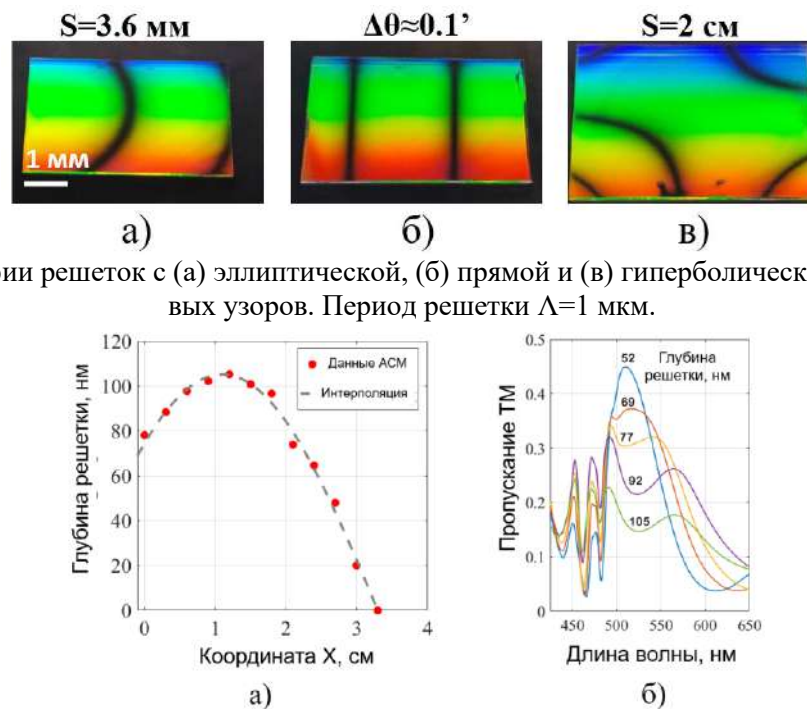


Рис. 2. Фотографии решеток с (а) эллиптической, (б) прямой и (в) гиперболической формой муаровых узоров. Период решетки $\Lambda=1$ мкм.

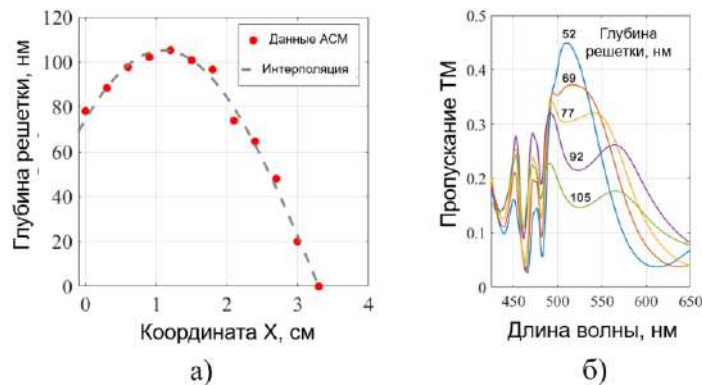


Рис. 3. (а) Измеренная зависимость глубины решетки от координаты вдоль ее поверхности. Период решетки 300 нм. (б) Измерения резонансного пропускания через металлизированную одномерную решетку с меняющейся глубиной.

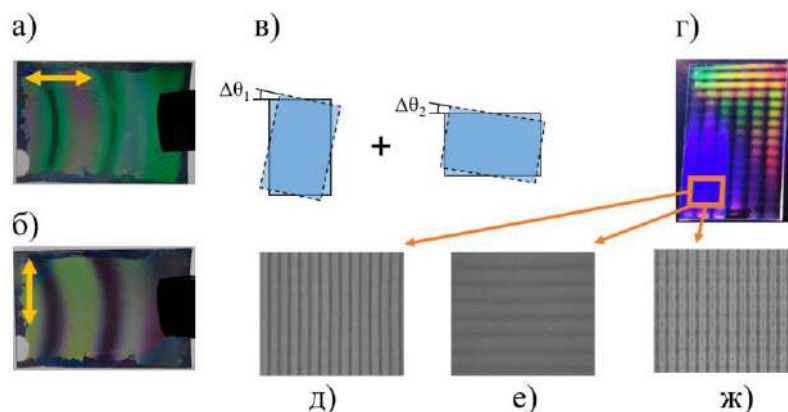


Рис. 4. (а)-(б) структурный цвет от разных глубин металлизированной решетки в пропускании с поляризациями, указанными желтыми стрелками. (в) схема облучения фоторезиста для создания двумерной решетки со сложной топографией. (г) Двумерная решетка, объединяющая разные виды топографий: вертикальные линии (д), горизонтальные линии (е), суперпозиция (ж).

Предложенный метод может быть легко использован также для синтеза двумерных решеток со сложной топографией, см. Рис. 4в-ж.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90034.

Литература

1. Ushkov, Andrei A., et al. Systematic study of resonant transmission effects in visible band using variable depth gratings // Scientific reports 2019. V. 9. P.1.
2. Ushkov, A. A., et al. Subwavelength diffraction gratings with macroscopic moiré patterns generated via laser interference lithography // Optics Express 2020 V. 28. P. 16453.
3. Lee, Yohan, et al. Metamaterials and metasurfaces for sensor applications // Sensors 2017. V. 17. P. 1726.

УДК 537.6

Микромагнитное моделирование электроиндуцированного ферромагнитного резонанса в магнитном туннельном переходе

С.В. Соловьёв

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

С развитием технологий роста плёнок появилась возможность изготовления магнитных гетероструктур со сверхтонкими магнитными слоями. В таких слоях сильное влияние на электрические и магнитные свойства оказывают межслойные границы, условия на которых способны доминирующим образом определять свойства всего слоя. В качестве примеров можно привести хорошо известный эффект гигантского магнитосопротивления и наведение перпендикулярной магнитной анизотропии (ПМА) в гетероструктурах CoFeB/MgO. С появлением спин-вентильных структур возникло два основных способа управления намагниченностью свободного слоя — либо посредством внешнего магнитного поля, либо за счёт эффекта передачи спинового вращательного момента. Причём, механизмы управления намагниченностью слоёв могут быть использованы не только для применения спин-вентильных структур в качестве элементов запоминающих устройств, но и для работы с СВЧ-сигналами, поскольку собственные частоты колебаний намагниченности слоёв могут лежать в пределах от единиц до десятков гигагерц. Этому способствует также обнаруженный эффект выпрямления переменного сигнала магнитным туннельным переходом (МТП) — так называемый спин-диодный эффект [1], который обусловлен передачей спинового вращательного момента при протекании спин-поляризованного тока через структуру. Недавно, в результате исследований спин-зависимого экранирования и изменения магнитоанізотропных свойств сверхтонких плёнок переходных металлов, был предложен новый способ выпрямления переменного сигнала — за счёт индуцирования ферромагнитного резонанса переменным электрическим полем в свободном слое МТП [2].

В этой работе методом микромагнитного моделирования свободного слоя МТП на примере сплава CoFeB и туннельного барьера из MgO изучается влияние геометрии свободного слоя и свойств материала на спин-диодную чувствительность по отношению к входному СВЧ-сигналу. Исследуется роль спин-поляризованного тока и электроиндуцированного изменения магнитной анизотропии (англ. voltage-induced magnetic anisotropy — VCMA) в возбуждении колебаний намагниченности свободного слоя. Рассматривается зависимость спин-диодной чувствительности от толщины свободного слоя, а также сопутствующий с увеличением толщины переход от перпендикулярной к плоскостной намагниченности.

Результаты моделирования показывают, что эффективность возбуждения колебаний намагниченности за счёт эффекта VCMA падает вместе с увеличением толщины свободного слоя МТП, что обусловлено действием эффекта VCMA только в пределах длины экранирования. Усиление электроиндуцированным изменением анизотропии спин-диодного эффекта вызванного протеканием спин-поляризованного тока возможно в случае сверхтонких плёнок ($t < 2$ нм). Эффективность возбуждения растёт с увеличением коэффициента VCMA, определяющего вклад в эффективное поле свободного слоя.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект 19-12-00432.

Литература

1. Tulapurkar A. A. *et al.* Spin-torque diode effect in magnetic tunnel junctions // Nature. – 2005. – Vol 438, Iss. 7066. – P. 339–342.
2. Nozaki T. *et al.* Electric-field-induced ferromagnetic resonance excitation in an ultrathin ferromagnetic metal layer // Nature Physics. – 2012. – Vol. 8, Iss. 6. – P. 491–496.

УДК 537.874.4

Моделирование плазмонных наноджетов

М.О. Никитин, А.С. Тарадин, А.В. Арсенин, В.С. Волков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Представлены результаты численного моделирования плазмонных наноджетов, формируемых за счёт конструктивной интерференции падающей и переотражённых волн. Плазмонные наноджеты – это области пространства в которых наблюдается локальное усиление поля поверхностных электромагнитных волн, при этом локально интенсивность поля может в десятки раз превышать интенсивность поля падающей волны [1, 2].

На рисунке 1 (а) схематично представлена геометрия решаемой задачи: тонкая золотая плёнка нанесена на кремниевую подложку со слоем оксида кремния (300 нм). На плёнке методами электронной литографии сформирован кубоид из диэлектрического материала. Поверхностная электромагнитная волна, или поверхностных плазмон-поляритон (ППП), возбуждаемый на металлической решетке, примыкающей к одной из сторон кубоида, рассеивается на нем. В результате интерференции рассеянного излучения формируется сложная картина распределения интенсивности поля – плазмонный наноджет [1].

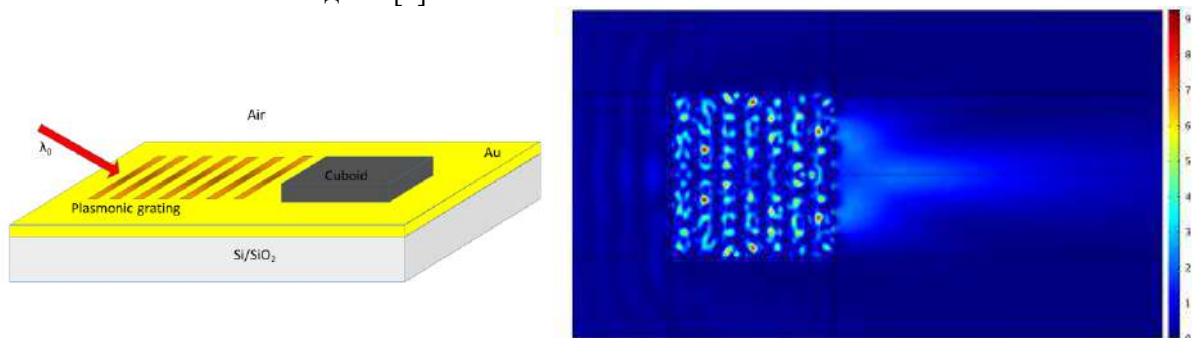


Рис 1. (а) Схематичное представление геометрии задачи: тонкая золотая пленка на подложке и диэлектрический кубоид. (б) Распределение интенсивности поля при рассеянии на диэлектрическом кубоиде.

Нами численно решена задача оптимизации параметров (высоты, длины и показателя преломления диэлектрического кубоида) для локализации и максимизации интенсивности поля. На рисунке 1 (б) представлен пример расчета для кубоида высотой 300 нм, длиной 5 мкм и показателем преломления 3.48. Все вычисления выполнены с помощью коммерчески доступной программы численного моделирования методом конечных элементов Comsol Multiphysics.

Работа выполнена при частичной поддержке Минобрнауки России (0714-2020-0002) и РФФИ (20-07-00840, 18-37-20061 и 18-29-02089).

Литература

1. Minin I.V. et al. Plasmonic nanojet: an experimental demonstration // Optics Letters. 2020. V. 45. P. 3244.
2. Fan X. et al. Light scattering and surface plasmons on small spherical particles // Light: Science & Applications. 2014. V. 3. P. e179.

УДК 537.874.4

Наноструктурированный графен как перспективный материал для создания биологических сенсоров

В.С. Волков¹, А.А. Воронов¹, С.М. Новиков¹, Д.Е. Татаркин¹, Ю.В. Стебунов¹, А.В. Арсенин¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Уникальные свойства графена делают его перспективным материалом для использования в биосенсорных технологиях. В последние годы были предложены различные новые платформы на основе графена (как чистого так и модифицированного различными наноструктурами) для усиления чувствительности биосенсоров [1-4]. Некоторые из этих технологических решений уже нашли свое практическое применение в различных схемах биосенсинга [5, 6].

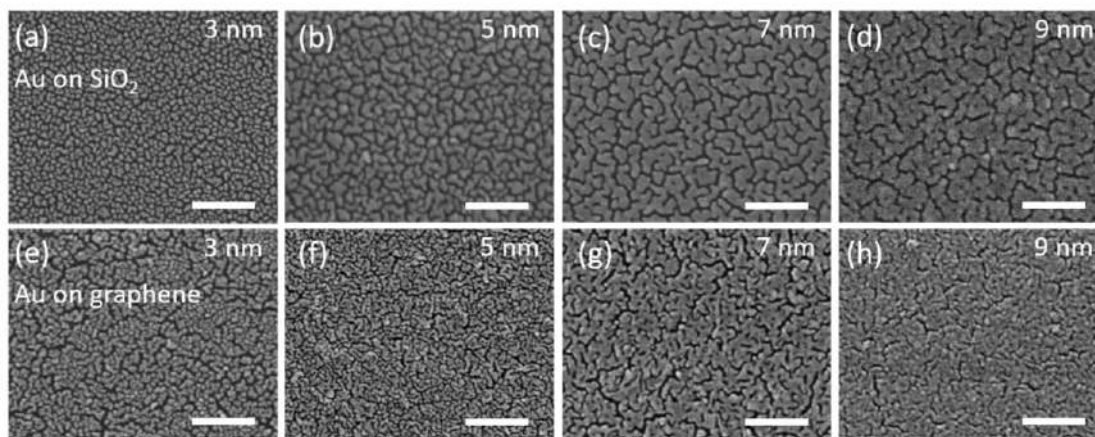


Рис. 1 СЭМ-изображения морфологии пленок золота, нанесенных на подложку SiO₂/Si толщиной (a) 3 нм (b) 5 нм (c) 7 нм (d) 9 нм, и на подложку графен/SiO₂/Si толщиной (e) 3 нм (f) 5 нм (g) 7 нм (h) 9 нм. Масштабная линейка составляет 200 нм.

В данной работе мы изучаем биосенсоры и биосенсорные системы на основе графена наноструктурированного ансамблями металлических наночастиц выбранного размера (Рис. 1). Показано, что сочетание двумерных материалов и экспериментальных методов направленного осаждения наночастиц позволяет формировать наноструктурированные поверхности с улучшенными плазмонными свойствами для применения в биосенсорных технологиях. Обсуждаются преимущества (и недостатки) таких гибридных (графен/металлические наночастицы) подложек для повышения биочувствительности по сравнению с обычными подложками без графена. В работе сравниваются различные методы биодетектирования и представлены наши взгляды на развитие данной области.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России (0714-2020-0002).

Литература

1. Beams R. et al. Raman characterization of defects and dopants in graphene // J. Phys. Condens. Matter. 2015. V. 27. P. 083002.

2. Stebunov Y. et al. Highly sensitive and selective sensor chips with graphene-oxide linking layer // ACS Applied Materials & Interfaces. 2015. V. 7. P. 21727.
3. Stebunov Y.V. et al. Functionalization of chemically derived graphene for surface plasmon resonance (SPR) biosensors / Chemically Derived Graphene: Functionalization, Properties and Applications, ed. J. Zhang, Royal Society of Chemistry. 2018.
4. Novikov S.M. et al. Plasmonic properties of nanostructured graphene with silver nanoparticles // Journal of Physics: Conference Series. 2020. V. 1461. P. 012119.
5. Fan H. et al. Fabrication, mechanical properties, and biocompatibility of graphene-reinforced chitosan composites // Biomacromolecules. 2010. V. 11. P. 2345.
6. Tatarikin D. et al. Surface-enhanced Raman spectroscopy on hybrid Graphene/Gold substrates near the percolation threshold // Nanomaterials. 2020. V. 10. P. 164.

УДК 535.215.4

Об оптимальном выборе контактной пары металлов в фотодетекторах на основе графена

В.А. Сёмкин, Д.А. Мыльников, Е.И. Титова, Д.А. Свинцов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Одно из ключевых свойств графена — отсутствие запрещённой зоны. Оно позволяет достаточно просто легировать графен носителями тока при контакте с металлом. В результате такого легирования образуется барьер Шоттки, который, однако, является прозрачным для носителей и не вносит вклад в контактное сопротивление. Это позволяет создавать простые детекторы излучения на графеновых переходах, естественно возникающих при изготовлении контактов к графену.

Однако, для эффективного использования естественного легирования важно знать степень легирования графена при контакте с тем или иным металлом. Выбор металлов исходя из знания о его легирующем воздействии на графен позволит создавать фотодетекторы с повышенной чувствительностью в независимости от механизма детектирования излучения. Будь то фотовольтаический эффект, для усиления которого необходимо максимизировать разность энергий Ферми на р-п переходе, либо термоэлектрический, в котором главную роль играет максимальность разности коэффициентов Зеебека, который, в свою очередь, зависит от энергии Ферми.

Показано, что в детекторах на основе переходов в графене доминирующим механизмом детектирования является термоэлектрический эффект [1]. Он заключается в возникновении фотонапряжения в веществе в ответ на его нагрев. Возникающая разность потенциалов пропорциональна разности температур с коэффициентом пропорциональности, называемым коэффициентом Зеебека. Фотодетекторы, основанные на использовании термоэлектрического эффекта в графене, представляют большой интерес для широкополосной (от видимого до ТГц излучения) [2-5] и сверхбыстрой регистрации сигналов (до десятков ГГц) [2,4]. Особенно это актуально для дальнего ИК диапазона, в котором отсутствует разнообразие детекторов, а отсутствие запрещённой зоны в графене позволяет ему поглощать излучение из данного диапазона.

Рассмотрим модель резкого скачка коэффициента Зеебека на образованном металлом и графеном переходе. В таком случае, освещение области контакта приводит к возникновению фотонапряжения пропорционального разности в коэффициентах Зеебека между графеном в приконтактной области и графеном в остальной части канала (рис. 1а). При равномерном освещении всего устройства фотонапряжение пропорционально теперь уже разности коэффициентов Зеебека в приконтактных областях (рис. 1б). Следовательно, для достижения максимальной чувствительности детектора за счёт материала контактов, металлы должны придавать разную степень легирования и их выбор должен производиться из соображений максимизации разности коэффициентов Зеебека.

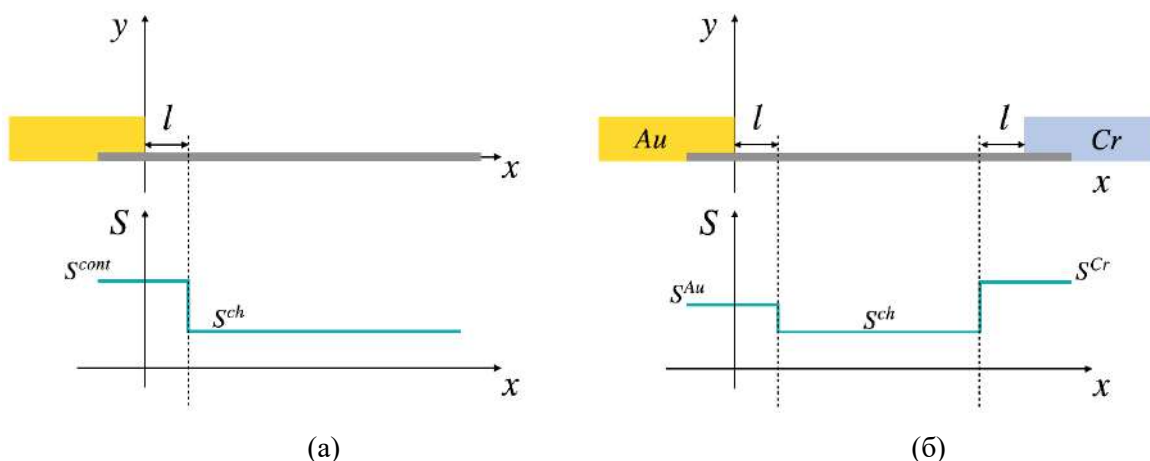


Рис. 1. (а) Модель ступенчатого изменения коэффициента Зеебека возле контакта металл-графен. (б) Рассмотрение двух контактов из разных металлов, например, из золота и хрома.

В представляемой работе количественно изучен вопрос эффективности использования пары золото-хром в фототермоэлектрическом детекторе на основе графена. Детектор изучался при освещении лазерным излучением с длиной волны 8.6 мкм, размер лазерного пятна был много меньше размеров детектора. Поочерёдно освещая контакты и измеряя зависимости фотонапряжения от напряжения на затворе, определялись напряжения затвора, при которых обнуляется фотонапряжение. Обнуление фотонапряжения соответствует выравниванию коэффициента Зеебека в канале с фиксированным коэффициентом в приконтактной области освещаемого перехода. Эта информация, а также затворная зависимость сопротивления и положение точки электронейтральности на ней, позволила определить энергии Ферми и коэффициенты Зеебека графена в приконтактных областях. Также был вычислен эффективный коэффициент Зеебека, равный разности приконтактных коэффициентов Зеебека и определяющий суммарное фотонапряжение на детекторе при его равномерном освещении (рис. 2). Кроме того, определён потенциально возможный эффективный коэффициент Зеебека. Он на порядок превосходит имеющийся, что свидетельствует о возможности увеличения чувствительности фотодетектора на порядок за счёт оптимального подбора металлов, обеспечивающих больший эффективный коэффициент Зеебека.

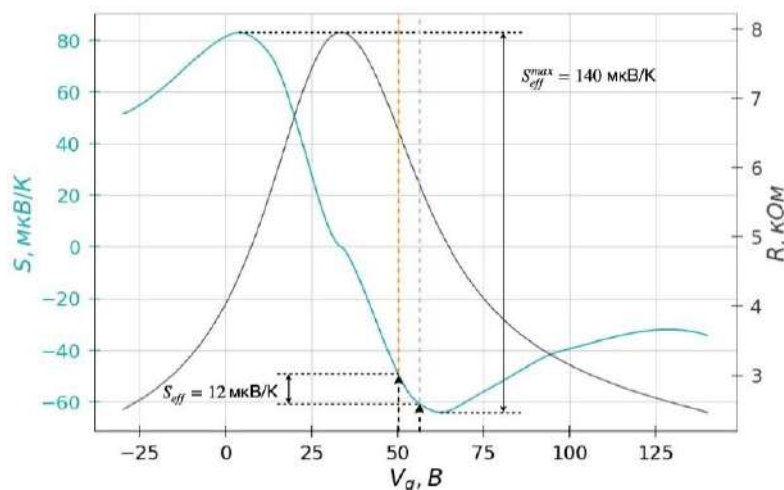


Рис. 2. Коэффициент Зеебека и сопротивление графена в канале детектора в зависимости от напряжения на затворе. Показаны фактический и возможный эффективные коэффициенты Зеебека изученного детектора. Оранжевая и серая пунктирные линии указывают положения уровней Ферми в графене, индуцированных золотом и хромом соответственно.

Литература

1. Song J. [et al.] Hot Carrier Transport and Photocurrent Response in Graphene // Nano Lett. 2011, 11, 11, 4688-4692.
2. Mueller T. [et al.] Graphene photodetectors for high-speed optical communications // Nature Photon. 4, 297–301 (2010).

3. *Mittendorff M.* [et al.] Ultrafast graphene-based broadband THz detector // *Appl. Phys. Lett.* 103, 021113 (2013).
4. *Cai X.* [et al.] Sensitive room-temperature terahertz detection via the photothermoelectric effect in graphene // *Nat. Nanotech* 9, 814–819 (2014).
5. *Castilla S.* [et al.] Fast and Sensitive Terahertz Detection Using an Antenna-Integrated Graphene pn Junction // *Nano Lett.* 2019, 19, 5, 2765–2773.

УДК 537.6

Оптимизация несмещенного спинового диода с перпендикулярной анизотропией

А.Г. Буздаков^{1,3}, П.Н. Скирдов^{1,2,3}, К.А. Звездин^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

³Российский квантовый центр

Спиновый диод, работающий на эффекте переноса спина, является достаточно новой технологией в спинтронике. Это устройство может успешно использоваться для обнаружения радиочастотных сигналов и сбора микроволновой энергии, поскольку его чувствительность может превышать чувствительность широко используемых на сегодняшний день диодов Шоттки. Одной из наиболее перспективных конфигураций такого вида спиновых диодов является многослойная структура с перпендикулярной магнитной анизотропией в свободном слое. Различные соотношения между магнитной анизотропией и магнитостатическим полем от нижних магнитных слоев приводят к разным наклонам намагниченности свободного слоя, что, в свою очередь, сильно влияет на свойства спинового диода. По мотивам работ [1] и [2], мы исследовали многослойный материал $\text{Co}_{20}\text{Fe}_{60}\text{B}_{20}/\text{MgO}/\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}/\text{Ru}/\text{Co}_{70}\text{Fe}_{30}$ для разной толщины $\text{Co}_{20}\text{Fe}_{60}\text{B}_{20}$.

Используя разную толщину свободного магнитного слоя, что приводит к разному наклону намагниченности, мы систематически исследовали чувствительность спинового диода в отсутствии внешнего магнитного поля и постоянного тока смещения. Для анализа чувствительности использовались численные подходы, которые включали макро-, микромагнитное моделирование и аналитический подход, основанный на уравнении Ландау-Лифшица-Гильберта в приближении колебаний малой амплитуды. Все теоретические подходы показывают сильную зависимость чувствительности спинового диода от угла намагниченности свободного слоя и достигают максимального значения в угловой области, не равной угловым областям, исследованным в более ранних работах. Наши результаты позволяют лучше понять работу спиновых диодов и помогут достичь рекордной чувствительности таких устройств.

Выражаем благодарность Российскому научному фонду за поддержку проекта № 19-12-00432.

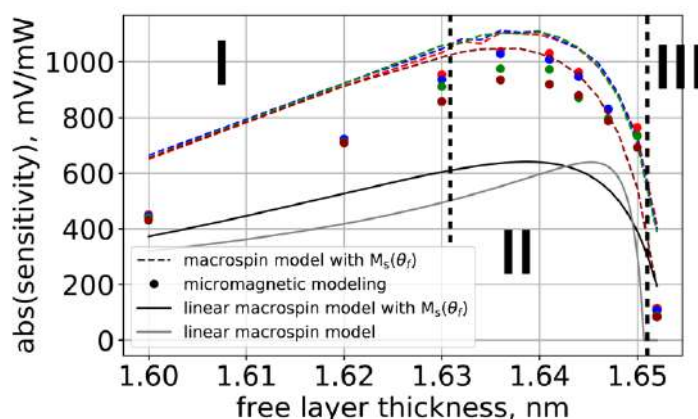


Рис. 1. Зависимости чувствительности исследованного спинового диода от толщины свободного слоя (угла намагниченности): серая сплошная линия – линейная макроспиновая модель, черная сплошная линия – линейная макроспиновая модель с переменной намагниченностью насыщения, пунктирные линии – макроспиновая модель с переменной намагниченностью насыщения, точки – микромагнитная модель. Цветом показан входная мощность: красный – 2 нВт, синий – 10 нВт, зеленый – 100 нВт, коричневый – 1000 нВт.

Литература

1. Fang B. et al. Giant spin-torque diode sensitivity in the absence of bias magnetic field // Nature Communications. 2016. № 1 (7).
2. Zhang L. et al. Ultrahigh detection sensitivity exceeding 105 V/W in spin-torque diode // Applied Physics Letters. 2018. № 10 (113). С. 102401.

УДК 538.95

Оптические свойства графена, синтезированного химическим осаждением из газовой фазы

М.А. Элсайд^{1,2}, Н.В. Дорошина¹, Д.И. Якубовский¹, П. Мишра¹, Г.И. Целиков¹, Г.А. Ермолаев¹, В. Соловей¹, А.А. Вишневый¹, С.М. Новиков¹, А.В. Арсенин¹, В.С. Волков¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Menoufia University, Shebin El-Koom

К настоящему времени опубликовано более десяти работ в которых изучались оптические свойства графена. Можно найти оптические константы для расслоенного графена [1] и графена, синтезированного химическим осаждением из газовой фазы [2], а также для случаев, когда графен переносится на различные подложки [3, 4], например, стекло, оксид кремния, плавленый кварц и др. Все эти данные имеют заметные отличия друг от друга, которые вызваны не только способом получения графена, влиянием подложки или качеством графена, но и использованием различных эллипсометрических моделей и исходных предположений. Например, при анализе оптических свойств графена можно учитывать адсорбцию воды и наличие остатков полимера [5-7]. Поэтому, несмотря на обширные исследовательские усилия, посвященные изучению оптического отклика монослойного графена, остаются вопросы, связанные с выбором оптических постоянных, соответствующих задаче, решаемой в ходе конкретного исследования.

В настоящей работе нами предложена модель для спектральной эллипсометрии, которая позволяет извлечь оптические константы монослойного графена без предположений о наличии воды и значительного количества полимерных остатков. Оптические свойства графена изучались с помощью эллипсометрии в спектральном диапазоне от 240 до 1000 нм. Данные эллипсометрии сопоставлены со спектрами пропускания графена и спектрами комбинационного рассеяния для графена на различных подложках (плавленый кварц, оптическое стекло, SiO₂/Si). Для структурной характеристики изучаемых образцов использовалась оптическая, растровая электронная и атомно-силовая микроскопия.

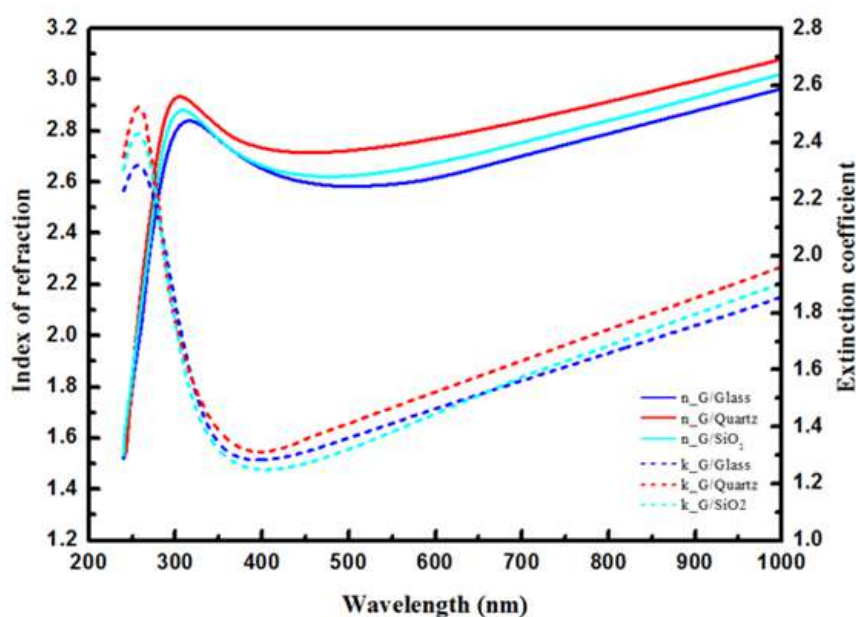


Рис 1. Оптические константы n и k для графена на оптическом стекле (красный), плавленом кварце (голубой) и подложке SiO₂/Si (темно синий)

Литература

1. Kravets V. G. et al. Spectroscopic ellipsometry of graphene and an exciton-shifted van Hove peak in absorption // Physical Review B. 2010. V. 81. P. 155413.
2. Nelson F. J. et al. Optical properties of large-area polycrystalline chemical vapor deposited graphene by spectroscopic ellipsometry // Applied Physics Letters. 2010. V. 97. P. 253110.
3. Matković A. et al. Spectroscopic imaging ellipsometry and Fano resonance modeling of graphene // Journal of Applied Physics. 2012. V. 112. P. 123523.
4. Matković A. et al. Influence of transfer residue on the optical properties of chemical vapor deposited graphene investigated through spectroscopic ellipsometry // Journal of Applied Physics. 2013. V. 114. P. 093505.
5. Ochoa-Martínez E. et al. Determination of a refractive index and an extinction coefficient of standard production of CVD-graphene // Nanoscale. 2015. V. 7. P. 1491.
6. Song B. et al. Broadband optical properties of graphene and HOPG investigated by spectroscopic Mueller matrix ellipsometry // Applied Surface Science. 2018. V. 439. P. 1079.
7. Castriota M. et al. Variable Angle Spectroscopic Ellipsometry investigation of CVD-grown monolayer graphene // Applied Surface Science. 2019. V. 467-468. P. 213.

УДК 535.3

Оптические свойства резонансного одномерного фотонного кристалла со 100 квантовыми ямами InGaN

А.А. Иванов^{1,2}, В.В. Чалдышев^{1,2}

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

²Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе

В настоящее время физика фотонных кристаллов является одной из наиболее интересных областей твердотельной оптической спектроскопии, в которой активно проводятся фундаментальные исследования, а также технологические поиски и разработки будущих технических применений. Резонансная брэгговская структура служит примером резонансного одномерного фотонного кристалла, поскольку вклад экситонного резонанса в оптическое отражение значительно усиливается в периодических структурах с квантовыми ямами с периодом, при котором брэгговское условие выполняется на частоте экситонного резонанса в квантовых ямах [1]. Данный факт, а также большая энергия связи экситона в GaN, позволяет нам наблюдать существенный вклад экситонного резонанса в спектры отражения периодической полупроводниковой гетероструктуры с квантовыми ямами InGaN/GaN при комнатной температуре [2]. Так как экситонные состояния в квантовых ямах, чувствительны к внешним воздействиям, например, приложению электрического поля, то представляется возможность управлять отражением света, управляя параметрами экситонного резонанса в среде. Таким образом, резонансные брэгговские структуры InGaN/GaN могут позволить изменить функциональность пассивных устройств на основе брэгговских отражателей света.

В данной работе проведено экспериментальное исследование оптических свойств образца из 100 квантовых ям InGaN, расположенных в периодической последовательности и разделенных барьерами GaN, так что брэгговский резонанс электромагнитных волн мог быть реализован на частоте экситонов в квантовых ямах. Образец был выращен с использованием метода газовой фазной эпитаксии из паров металлоорганических соединений и имеет некоторую неоднородность толщины слоев. Вращение пластин во время процесса роста не использовалось, поэтому структура намеренно имеет некоторый градиент толщины слоя и концентрации In, следовательно, оптические свойства разных областей образца отличаются друг от друга. В разных точках образца период структуры может достигнуть разницы около 10%. Для того чтобы повысить структурное совершенство активной области образца, между резонансной брэгговской структурой и сапфировой подложкой выращен буферный слой GaN толщиной ~ 3 мкм. В буферном слое концентрируется основная часть всех дефектов, образованных из-за несоответствия периодов кристаллической решетки сапфира и эпитаксиального слоя.

Измерения спектров оптического отражения и пропускания проводились для разных углов падения и поляризаций света в условиях комнатной температуры. Для определения параметров экситонов в квантовых ямах использовалось компьютерное моделирование оптических спектров, основанное на использовании метода матриц переноса, которые строятся на основе формул экситонного отражения и пропускания, приведенных в работе [1]. Результаты моделирования совместно с результатами измерений представлены на рис. 1(а) и 1(б). Так как исследуемый образец имеет неоднородность толщин слоев, толщина структуры задавалась пачками по 10 квантовых ям с одинаковой толщиной, которая в свою очередь является средним значением толщины в данной выборке. Между расчетным и экспериментальным спектрами пропускания расхождения увеличиваются и становятся существенными в области длин волн ниже 385 нм. Наиболее важной причиной данных расхождений является хвост оптического поглощения в буферном слое и барьерах GaN. Также мы учли тот факт, что валентная зона в полупроводниках со структурой вюрцита расщеплена спин-орбитальным взаимодействием на три близко расположенных подзоны, поэтому в расчете использовались экситоны А, В и С типа с энергиями 3.15, 3.2 и 3.23 эВ соответственно (на рисунке указаны стрелками).

Таким образом, данная модель позволяет получить хорошее соответствие между экспериментальными и расчетными спектрами, выполненными с учетом экситон-фотонного взаимодействия. Параметр радиационного затухания определен равным $(0,25 \pm 0,02)$ мэВ, а параметр нерадационного затухания 40 мэВ. В рамках данной модели был проведен анализ того, как влияет неоднородность толщин слоев в резонансной брэгговской структуре на ее оптические свойства, поскольку для практических применений является важным оценка критического отклонения толщины от строгой периодичности на формирование резонансного оптического отклика структуры (рис. 2). Если в качестве параметра беспорядка в системе использовать среднеквадратичное отклонение, то такой параметр определен равным $(8 \pm 1) \%$.

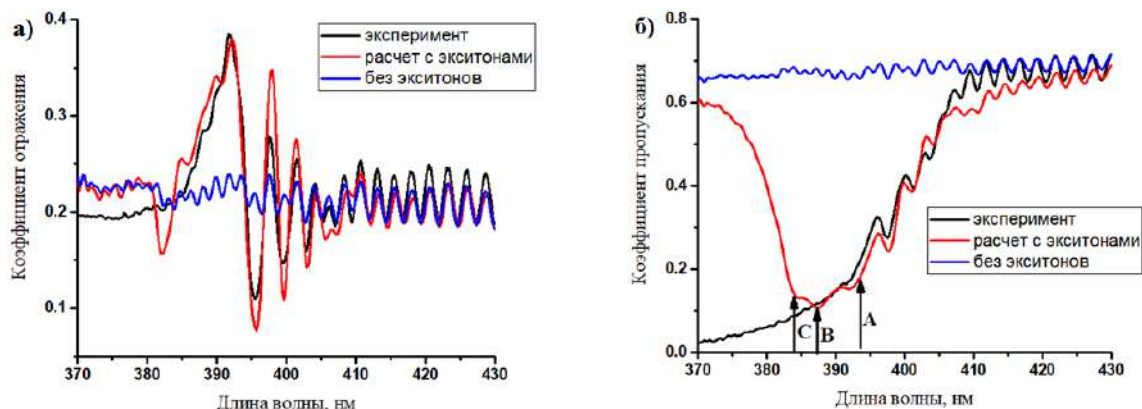


Рис. 1. Спектры оптического отражения (а) и пропускания (б) резонансной брэгговской структурой со 100 квантовыми ямами InGaN. Угол падения света 20° , S-поляризация.

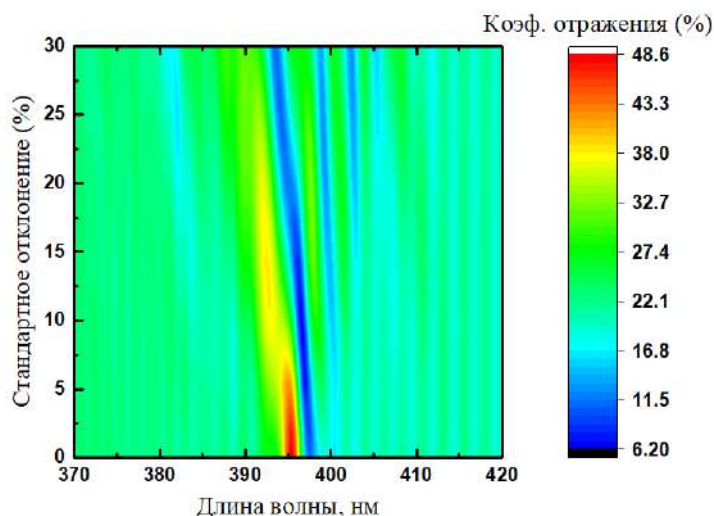


Рис. 2. Спектры оптического отражения от структуры со 100 квантовыми ямами InGaN при различных значениях стандартного отклонения от точной периодичности в пространственном расположении ям.

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. [et al.].* Optical lattices of InGaN quantum well excitons // Appl. Phys. Lett. 2011. V. 99. P. 251103.

УДК 535.417.26

Оптический микрорезонатор Фабри-Перо, полученный методом двухфотонной литографии

*А.В. Писаренко¹, Д.А. Щербаков¹, Д.А. Колымагин¹, Д.А. Чубич¹, Р.Д. Звагельский¹,
А.Г. Витухновский^{1,2}*

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

На сегодняшний момент существуют разные виды однофотонных источников. Квантовые точки и центры окраски в алмазах являются наиболее исследованными. Однако центры окраски в алмазе, такие как NV и SiV, нашли широкое применение в квантовой фотонике в силу их способности испускать одиночные фотоны при комнатной температуре. Идеальный однофотонный источник должен излучать фотоны с высокой скоростью в одной моде, однако скорость эмиссии ограничивается спонтанным излучением источника и излучение распределено в телесном угле 4π . С целью повышения скорости эмиссии и уменьшения углового распределения одиночных фотонов, его можно поместить в микрорезонатор. При этом время спонтанного излучения должно уменьшиться в $f = \frac{3Q\lambda^3}{4\pi V}$, где Q – добротность резонатора, λ – длина волны в среде, V – модовый объем [1]. Поэтому при повышении добротности микрорезонатора, можно добиться эффективной работы однофотонного источника.

Существуют разные подходы реализации микрорезонаторов. В работе [2] был реализован тороидальный резонатор с ультравысокой добротностью, а в работе [3] был представлен подход создания микрорезонатора Фабри-Перо (ФП) с двумя отражающими поверхностями с помощью двухфотонной фотополимеризации.

В данной работе был изготовлен оптический микрорезонатор ФП с помощью метода двухфотонной литографии, который позволяет создавать структуры сложной трехмерной геометрии. Метод заключается в следующем: жидкий резист облучается лазерным фемтосекундным импульсом, и в области перетяжки луча происходит его полимеризация. С помощью пьезосканера производится перемещение образца по всем 3 измерениям по заданным траекториям с контролируемой скоростью, что позволяет создавать полимерные структуры произвольной формы.

Предложенная модель интерферометра ФП (рис. 1) также включает в себя специальную подложку с многослойным диэлектрическим покрытием, обладающую селективными отражающими свойствами, и слой металла, напыленный на изготовленную методом двухфотонной литографии полимерную структуру. В свою очередь, полимерная микроструктура состоит из четырех опорных столбов, удерживающие поверхность, на которую на следующем этапе изготовления наносится металлический отражающий слой. Верхняя часть полимерной структуры является сегментом поверхности второго порядка с некоторой толщиной, задаваемой на этапе двухфотонной литографии. Меняя параметры микрорезонатора, такие как база интерферометра, форма и толщина полимерной структуры для напыления оптически отражающего металлического слоя, а также высоту опорной части структуры, можно достичь нужных характеристик резонатора. Следует отметить, что на получаемую на этапе изготовления форму конструкции могут оказывать влияние несколько основных факторов: сила тяжести и поверхностные силы при деформировании микроструктуры. Поэтому с целью снижения искривления формы поверхности, экспериментально подбирались необходимая толщина верхней части микрорезонатора. Кроме того, изменяя кривизну поверхности верхнего слоя интерферометра, можно добиться нужного углового распределения излучения одиночных фотонов. Основной задачей, которая решалась на этапе оптимизации изготовления опорной полимерной конструкции, являлся подбор оптимальных параметров верхней части микрорезонатора, чтобы достигнуть эффективной работы однофотонных источников, помещенных внутрь. Также важную роль в

работе микроустройства играет шероховатость верхней части структуры: она должна быть в диапазоне десятка нанометров или менее, иначе добротность микрорезонатора в оптическом диапазоне будет невысокой. Методами оптической и электронной микроскопии была исследована морфология и геометрические параметры изготовленных полимерных структур. Также с помощью атомно-силовой микроскопии была измерена шероховатость верхней части резонатора.

Отработан метод изготовления микрорезонатора с помощью двухфотонной литографии и проведена оптимизация полимерной части опорной конструкции для микрорезонатора Фабри-Перо. Существенным преимуществом предложенного подхода является возможность изготовления микрорезонатора “по месту требования” - в необходимом месте фотонной интегральной схемы, а также совместимость со схемой Хэнбери Брауна-Твисса, что открывает возможность изготовления микрорезонатора Фабри-Перо непосредственно над источником одиночных фотонов.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 18-29-20129.

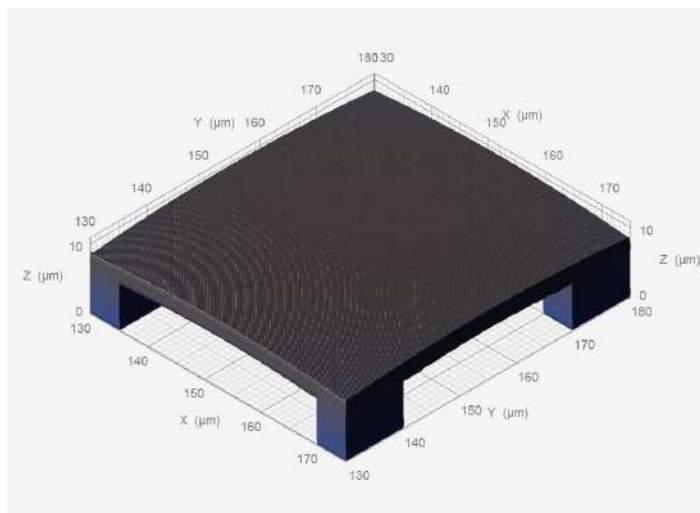


Рис.1. Графическая модель оптического резонатора ФП

Литература

1. E. M. Purcell Spontaneous emission probabilities at radio frequencies // Phys. Rev. 69, 681 (1946)
2. S. M. Spillane, T. J. Kippenberg, K. J. Vahala, K. W. Goh, E. Wilcut, H. J. Kimble Ultrahigh-Q toroidal microresonators for cavity quantum electrodynamics // Phys. Rev. 2005. A. 71.
3. F. Ortiz-Huerta, L. Chen, M. Taverne, J. P. Hadden, M. Johnson, Y. L. D. Ho, J. G. Rarity Fabrication of hybrid Fabry-Pérot microcavity using two-photon lithography for single-photon sources // Optics Express 2018. V. 26. Iss. 25. P. 33245-33252.

УДК 534.12

Оптомеханические модуляторы и сенсоры движения на основе массива нанонитей

Ю.В. Стебунов¹, А.В. Арсенин¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Прогресс в создании низкоразмерных систем стимулирует фундаментальные и прикладные исследования, направленные на теоретическое и экспериментальное изучение широкого спектра характерных для таких систем эффектов. Исследования в данной области получили новый импульс с открытием новых углеродных материалов (графена и углеродных нанотрубок), множества других двумерных материалов и различных квантовых материалов (ван-дер-ваальсовых гетероструктур и др.). Особо стоит отметить также уникальные механические свойства графена и углеродных нанотрубок и их аналогов [1]. Так, например, на основе этих материалов возможно создавать наноразмерные механические резонаторы с рекордными значениями резонансных частот (вплоть до гигагерц). В докладе представлены различные схемы оптомеханических модуляторов и сенсоров движения [2-4] на основе узких графеновых лент и углеродных нанотрубок. Представлены перспективные схемы резонаторов на основе крутильных колебаний графеновых нанолент, характеризующи-

еся более высокими резонансными частотами по сравнению с резонаторами на других видах механических колебаний. Рассмотрены аналогичные схемы на основе массива металлических или диэлектрических нанонитей. Предложенные схемы анализировались методами численного моделирования – определены предельные рабочие характеристики предложенных оптомеханических модуляторов и сенсоров движения.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-07-01339).

Литература

1. Lee C. et al. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene // Science. 2008. V. 321. P. 385.
2. Fedyanin D.Yu., Y.V. Stebunov. All-nanophotonic NEMS biosensor on a chip // Scientific Reports. 2015. V. 5. P. 10968.
3. Стебунов Ю.В. Лейман В.Г., Арсенин А.В., Гладун А.Д., Рыжый В.И. Резонансный детектор модулированного излучения терагерцового диапазона на основе углеродных нанотрубок // ЖТФ. 2012. Т. 82. С. 67.
4. Stebunov Yu.V. et al. Graphene Nanoribbon Based AM Demodulator of Terahertz Radiation // Nano/Micro Engineered and Molecular Systems (NEMS), IEEE International Conference on. 2012. P. 990-994 (2012).

УДК 534.12

Перестраиваемые метаповерхности с использованием нелинейных двумерных полупроводников

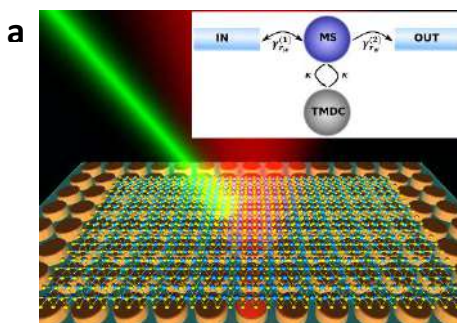
Н.С. Карманова¹, А.Е. Краснок²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Photonics Initiative, Advanced Science Research Center, City University of New York, NY 10031, USA

Нелинейные эффекты играют важнейшую роль в оптике. Например, нелинейные эффекты необходимы для полностью оптического управления светом, обработки, настройки и переключения источников излучения и генерации частот. Однако, из-за слабого взаимодействия фотонов друг с другом создание условий для проявления нелинейных эффектов на наноуровне затруднено. Поэтому материалы, в режиме сильной связи образующие гибридные состояния света с веществом, являются чрезвычайно важными для задач фотоники.

Благодаря своим оптическим свойствам атомарно тонкие дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) являются крайне привлекательными материалами особенно в таких областях как нанофотоника и квантовая оптика, в которых режим сильной связи имеет ключевое значение[1]. В данной работе показано, что структура, состоящая из метаповерхности и ДПМ (рис.1(а)) может обеспечить контролируемый переход из режима слабой связи в режим сильной связи при интенсивной лазерной накачке.



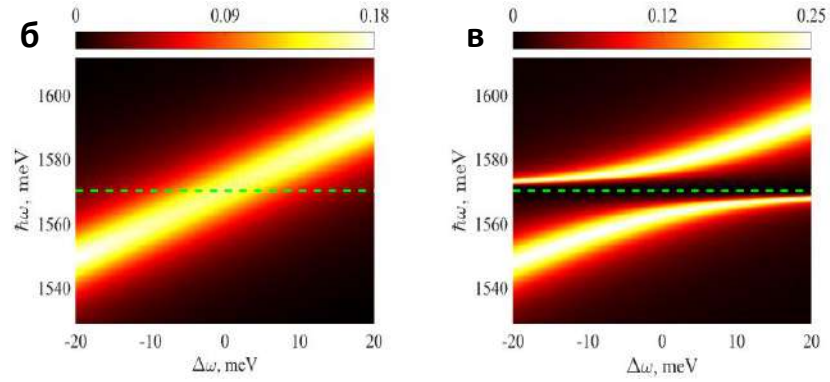


Рис.1 (а) Гетероструктура, состоящая из метаповерхности и ДПМ и схематическое изображение системы в теории связанных резонаторов(вставка). (б, в) Коэффициент отражения структуры в зависимости от расстройки между резонансными частотами экситонного резонанса и моды метаповерхности и частоты света накачки: (б) режим слабой связи (слабая накачка), (в) режим сильной связи (в режиме насыщения).

В данной работе рассматривалась возможность контролировать режим работы системы за счет регулировки скорости затухания поля в экситонной моде при изменении интенсивности накачки. Расчеты проводились на основе данных из экспериментальных работ по изучению динамики насыщения поглощения в однослойных ДПМ [2].

Режимы связи метаповерхности и ДПМ были рассмотрены в теории связанных резонаторов:

$$\begin{cases} \frac{dA_e}{dt} = i(\omega_e - \omega)A_e - \frac{\gamma_e}{1 + \frac{|A_e|^2}{|a_0|^2}}A_e + ikA_r \\ \frac{dA_r}{dt} = i(\omega_r - \omega)A_r - \gamma_r A_r + ikA_e + k_{rw}\tilde{s} \\ R = \frac{k_{rw}^{(1)}A_r}{\tilde{s}}; T = 1 - \frac{k_{rw}^{(2)}A_r}{\tilde{s}} \end{cases}$$

Здесь A_e, A_r – амплитуды поля в экситонном резонансе и моде резонатора (метаповерхности); ω_e, ω_r – соответствующие резонансные частоты; ω – частота накачки; $\gamma_e = \gamma_{ef}$ – скорость затухания поля в экситонном резонансе, равная скорости затухания связанного с поглощением поглощения; $\gamma_r = \gamma_{rf} + \gamma_{rw}^{(1)} + \gamma_{rw}^{(2)}$ – скорость затухания поля в резонаторе, складывающаяся из поглощения и излучения в каналы рассеяния; k – константа связи между ДПМ и резонатором; k_{rw}^i – константы связи резонатора с i -ым волноводом; $\tilde{s}$ – амплитуда поля накачки. Скорости затухания определяются как величины обратные ко временам затухания, связанным с соответствующими процессами $\gamma_i = 1/\tau_i$. Данный вид уравнений обосновывается тем, что экситонная мода ДПМ слабо взаимодействует с внешним излучением, т.е. обмен энергии между системой и окружением происходит исключительно через каналы метаповерхности.

Было выяснено, что возможно регулирование режима связи ДПМ с метаповерхностью полностью контролируемым образом при изменении интенсивности накачки. На рис. 1(б) показан коэффициент отражения системы в холодном режиме (при слабой накачке). Соответствующий вид зависимости, не содержащей каких-либо особенностей, характерен для режима слабой связи. На рис. 1(в) показан так же коэффициент отражения, но уже в условиях сильной накачки (для значения интенсивности, находящейся в области насыщения поглощения экситонного пика). На данном рисунке мы можем наблюдать значительное расщепление линий поглощения, характерное режиму сильной связи.

В данной работе предложен метод для полностью контролируемой перестройки режима связи ДПМ и метаповерхности при помощи изменения интенсивности входного излучения. Эти исследования открывают путь к новому классу нанофотонных, оптоэлектронных и квантово-оптических устройств с низкими потерями, основанных на периодических фотонных структурах в сочетании с двумерными экситонными материалами.

Литература:

1. S. Manzeli, D. Ovchinnikov, D. Pasquier, O. V Yazyev, and A. Kis, “2D transition metal dichalcogenides.”

2. A. Phys et al., “Broadband nonlinear optical response of monolayer MoSe 2 under ultrafast excitation excitation,” vol. 031108, no. October 2017, 2018.

УДК 537.877

Перестраиваемые состояния в континууме для управления фотонными системами

Т.Б. Салахов¹, А.Е. Краснок²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Photonics Initiative, Advanced Science Research Center, City University of New York

Стремление к захвату большого количества электромагнитной энергии в небольших объемах стало особенно интенсивным направлением исследований в последние несколько лет, в связи с достижением высоких добротностей и низких объемов мод с помощью различных подходов. Одним из таких подходов, обещающий экстремальное ограничение света стала концепция состояний в континууме (ЕЕ – embedded eigenstate).

ЕЕ представляют собой решения на собственных модах открытых структур, характеризующиеся неограниченной добротностью. Было продемонстрировано, что материалы с диэлектрической проницаемостью около нуля (ENZ) являются универсальной платформой для усиления взаимодействий материи со светом из-за их способности усиливать поля на границе раздела с диэлектриком [1]. Это делает возможным сильное взаимодействие света и вещества и использовалось для усиления эффекта Парселла, идеальных поглотителей [2], активных оптоэлектронных устройств [3] и усиления нелинейных эффектов [4]. Было продемонстрировано, что структура, состоящая из последовательно расположенных полубесконечных слоев ENZ-диэлектрик-ENZ, благодаря туннелированию ЭМ энергии из первого слоя ENZ во второй слой обладает резонансным пропусканием с высокой добротностью, при падении на нее ЭМ волны с определенной частотой ω_{res} и под определенным углом θ_{res} . [5]

В данной работе предлагается метод контроля параметров резонанса (угол и частота) в пропускании через данную слоистую структуру, благодаря модуляции ϵ диэлектрика. В качестве ENZ был взят 4H-SiC (рис.1а) с дисперсией выражаемой формулой

$$\epsilon_{SiC} = \epsilon_{\infty} \left(1 + \frac{(\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2)}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 + i\gamma\omega} \right), \quad (1)$$

где $\omega_{LO} = 29,08$ ТГц и $\omega_{TO} = 23,89$ ТГц – частоты продольного и поперечного оптических фононов соответственно, $\gamma = 0,04$ ТГц – поглощение, $\epsilon_{\infty} = 6,6$.

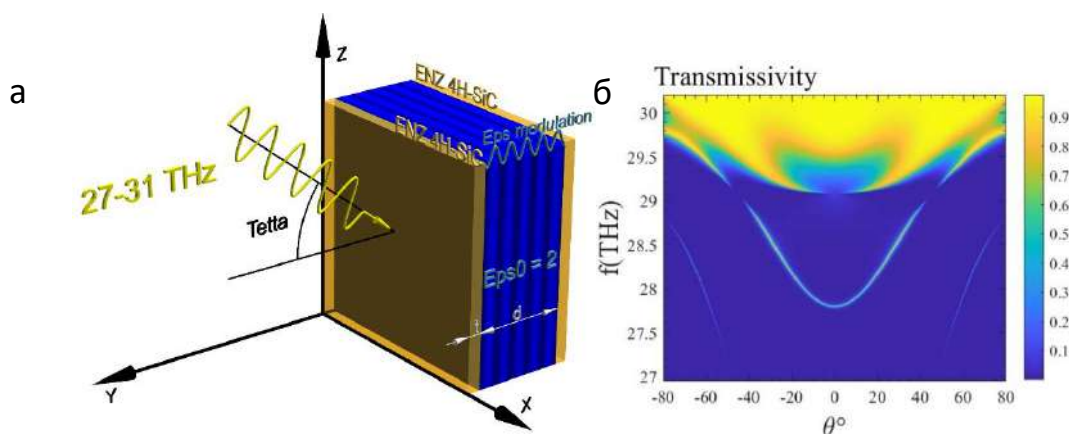


Рис.1 (а) Структура, состоящая из слоев ENZ (4H-SiC) с толщиной $t = 3$ мкм и слоя диэлектрика с толщиной $d = 21,07$ мкм и $\epsilon = 2$. (б) Зависимость коэффициента пропускания структуры от частоты и угла падения ЭМ волны.

Численное моделирование данной системы было проведено с использованием метода матриц переноса. Были получены зависимости коэффициентов пропускания, отражения и поглощения от угла падения и частоты падающей волны (рис.1б) без модуляции ϵ диэлектрика, а также с синусоидальной модуляцией. Для модуляции представленной стоячей продольной волной варьировалась глубина модуляции и количество полупериодов, уместяющихся на толщине диэлектрика. Для наглядности расчеты проводились на частотах выше и ниже резонанса (29,05 ТГц и 29,11 ТГц), так

как добротность самого резонанса чрезвычайно высока. Было обнаружено, что при увеличении глубины модуляции резонанс смещается в сторону меньших углов (рис.2а) и данное смещение усиливается с увеличением числа полупериодов модуляционной волны, до тех пор, пока длина волны модуляции не станет меньше длины волны возбуждения. (рис.2б)

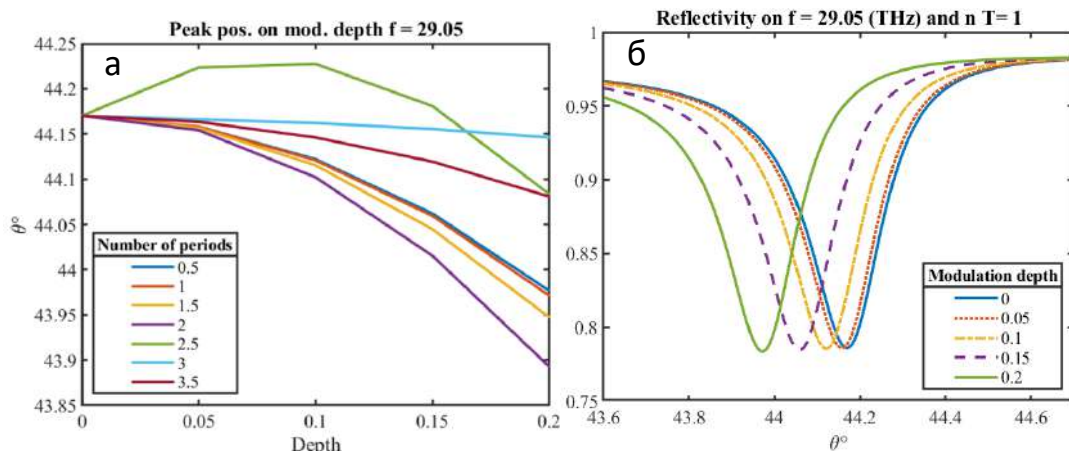


Рис.2 (а) Зависимость коэффициента отражения от угла падения волны возбуждения для различных глубин модуляций на частоте 29,05 ТГц. (б) Зависимость положения угла резонанса в зависимости от глубины модуляции для различного числа полупериодов модуляционной волны.

Итак, в данной работе был предложен метод контроля параметров резонансного пропускания с высокой добротностью в структуре ENZ-диэлектрик-ENZ. Мы показали, что высокая добротность ЕЕ позволяет достигать значительной перестройки даже под действием сравнительно слабых возмущений. В своей работе мы так же рассмотрели управление квазикогерентным тепловым излучением, выходящим из такой структуры с ЕЕ. Результаты данной работы могут найти применение в широком спектре нелинейных и перестраиваемых фотонных устройств.

Литература:

1. I. Liberal and N. Engheta, "Nonradiating and radiating modes excited by quantum emitters in open epsilon-near-zero cavities," *Sci. Adv.*, vol. 2, no. 10, p. e1600987, Oct. 2016, doi: 10.1126/sciadv.1600987.
2. S. Feng and K. Halterman, "Coherent perfect absorption in epsilon-near-zero metamaterials," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 86, no. 16, p. 165103, Oct. 2012, doi: 10.1103/PhysRevB.86.165103.
3. S. Vassant *et al.*, "Epsilon-near-zero mode for active optoelectronic devices," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 109, no. 23, p. 237401, Dec. 2012, doi: 10.1103/PhysRevLett.109.237401.
4. M. Z. Alam, S. A. Schulz, J. Upham, I. De Leon, and R. W. Boyd, "Large optical nonlinearity of nanoantennas coupled to an epsilon-near-zero material /639/624/399/1015 /639/624/400/385 letter," *Nat. Photonics*, vol. 12, no. 2, pp. 79–83, Feb. 2018, doi: 10.1038/s41566-017-0089-9.
5. Z. Sakotic, A. Krasnok, N. Cselyuska, N. Jankovic, and A. Alú, "Berreman Embedded Eigenstates for Narrowband Absorption and Thermal Emission," *Phys. Rev. Appl.*, vol. 13, no. 6, Mar. 2020, doi: 10.1103/PhysRevApplied.13.064073.

УДК 681.2.082

Перспективы применения волоконно-оптических систем мониторинга

Н.А. Казанский¹, И.Ф. Музафаров¹, П.И. Лысюк^{1,2}

¹Российский университет транспорта РУТ(МИИТ)
²ГБПОУ «Колледж связи №54» им. П.М. Вострухина

На сегодняшний день волоконно-оптические технологии нашли широкое применение в различных направлениях. Одним из таких направлений является организация среды передачи данных в телекоммуникационных сетях связи. Авторами доклада предлагается применять оптическое волокно в качестве высокоточного датчика физических параметров состояния строящихся магистралей высокоскоростного железнодорожного транспорта. К таким параметрам можно отнести температуру, давление, натяжение и другие.

На практике области применения волоконно-оптических систем мониторинга, это:

- медицинская техника;
- военные объектов;
- трубопроводный транспорт;
- объекты строительства.

Волоконно-оптические датчики подразделяются на два типа:

- сосредоточенные ВОД;
- распределенные ВОД.

Сосредоточенные ВОД предназначены для измерения физических параметров в локализованных местах. С помощью осуществляют измерения физических параметров сразу в нескольких точках по всей длине волоконно-оптического датчика.

В докладе показано, что физические воздействия на оптическое волокно, приводят к локальному изменению характеристик пропускания света. Следовательно, изменяются характеристики сигналов обратного отражения. Путем сравнения спектров и интенсивностей зондирующего лазерного сигнала и обратного отраженного сигнала, можно определить место и характер воздействия. Например, при нагревании оптического волокна, в кристаллической решетке возникает вибрационное облако электронов. С вибрационным облаком взаимодействует лазерное излучение, представляющее собой поток фотонов. Результатом такого взаимодействия является комбинационное рассеяние света, называемое эффектом Рамана. Таким образом, оптическое волокно является распределенным датчиком температуры.

В результате проведенного обзора установлено, что обратный отраженный оптический сигнал состоит из следующих составляющих:

- Рэлеевское рассеяние, с длиной волны равной длине волны лазерного сигнала;
- Рамановское рассеяние, состоящее из стоксовой компоненты (длина волны больше, чем у лазерного источника) и антистоксовой компоненты (длина волны меньше, чем у лазерного источника). Антистоксов диапазон от температуры зависит, а стоксов не зависит. Отношением этих компонент определяется локальная температура;
- Бриллюэновское рассеяние, имеет спектральный сдвиг из-за акустических колебаний.

В зависимости от характера внешнего физического воздействия будет изменяться интенсивность и характер обратного рассеяния. Так при нагревании оптического волокна интенсивность рассеяния антистоксова диапазона увеличивается, тогда как другие виды рассеяния реагируют на температуру незначительно. При использовании систем основанных на Рамановском рассеянии для измерения температурных воздействий возможно избавиться от погрешности, связанной с флуктуациями мощности зондирующего сигнала.

Температура и механические воздействия влияют на скорость звуковой волны в волокне, которая вызывает сдвиг частоты Бриллюэновского рассеянного сигнала относительно лазерного зондирующего сигнала.

Произведенный обзор дает основание сделать вывод о возможностях применения волоконно-оптических систем мониторинга для получения своевременной информации о состоянии инфраструктурных объектов высокоскоростного железнодорожного транспорта. Предлагается в системах волоконно-оптического дистанционного мониторинга в качестве зондирующих импульсов использовать несколько длин волн. Переход на одновременно несколько сканирующих сигналов позволит получить более подробную информацию об объекте мониторинга.

Литература

1. *Дмитриев С.А., Слепов Н.Н.* Волоконно оптические системы мониторинга состояния инфраструктурных объектов – Сб. статей под редакцией– М.: Экслибрис-Пресс, 2015. – 304с.;
2. Kazmierczak A., Jusza A., Slowikowski M., Stopinski S., Piramidowicz R. Integrated interrogator circuits for fiber optic sensor network in generic InP photonic integrated circuit technology. In Proceedings of the Optical Sensing and Detection V, Strasbourg, France, 23–26 April 2018;
3. *Bremera K., Wollweber M., Weigand F., Rahlves M., Kuhne M., Helbig R., Roth B.* Fibre optic sensors for the structural health monitoring of building structures – Procedia Technology 26, 2016, P.524 – 529;

4. Zhou, W.; Li, K.; Wei, Y.; Peng, H.; Mingbo, C.; Yongshun, L.; Yihui, W. Ultrasensitive label-free optical micro-fiber coupler biosensor for detection of cardiac troponin I based on interference turning point effect. *Biosens. Bioelectr.* 2018, 106, 99–104.
5. Qiao L., Li S., Wang Z., Tian H., Bi L. Geotechnical monitoring on the stability of a pilot underground crude-oil storage facility during the construction phase in China. *Measurement* 2016; 82:421 – 31.

УДК 539.2

Плазмонное усиление фототока в двумерных системах за пределами эффектов сильных полей

В.В. Силкин, Д.А. Свинцов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Возбуждение плазмонного резонанса является уже устоявшимся методом для усиления поглощения фотоприемных структур, и, следовательно, для усиления эффективности генерации фототока. Необходимым условием генерации фототока в любом детекторе является наличие выделенного направления, которое обычно задается напряжением смещения, встроенным электрическим полем или геометрической асимметрией. Если по полупроводнику распространяется бегущая электромагнитная волна – фотон или поверхностный плазмон – то ее волновой вектор сам задает выделенное направление для генерации фототока. Механизм генерации тока при этом состоит в передаче импульса от волны к электронам в полупроводнике, и называется фотонным или плазмонным увлечением (photonic / plasmonic drag), в зависимости от типа волны (1,2).

Теория подобного механизма генерации фототока до сих пор разработана только для гидродинамического режима электронного транспорта, который на практике достаточно редок (1). В данной работе мы разработали теорию плазмонного увлечения в двумерных электронных системах в рамках кинетической модели, т.е. на основе уравнения Больцмана для двумерных электронов. Расчет основан на последовательных приближениях для электронной функции распределения. Эффект генерации фототока появляется во втором порядке по электрическому полю плазмона; ожидаемо, он появляется только при ненулевом волновом векторе плазмона.

Мы показываем, что величина фототока резонансно возрастает при стремлении фазовой скорости волны v_{ph} к фермиевской скорости электронов v_F по закону $[1 - v_{ph}^2/v_F^2]^{-3/2}$. Данное усиление связано не с общепринятым усилением поля в условиях плазмонного резонанса, а с фазовым синхронизмом между плазмоном и движущимися электронами. В докладе также будет представлено количественное обсуждение ситуации $v_{ph} < v_F$, а также будет исследована роль нелинейных ограничений на максимальную величину фототока. Для электронов с параболическим законом дисперсии удастся показать, что в режиме сильного поля плазмона ток пропорционален напряженности поля в степени 3/2.

Исследованный эффект может наблюдаться при освещении контакта «металл - графен» даже в отсутствие р-п-переходов, индуцированных разностью работ выхода (3). Наиболее перспективной структурой является графен с близко расположенной металлической решеткой (4), где скорость плазмонов становится очень близкой к скорости Ферми из-за сильного экранирования кулоновского взаимодействия (5).

Литература

1. Popov V. V. Terahertz rectification by periodic two-dimensional electron plasma. *Applied Physics Letters*. 2013 – Т. 102., №. 25., С. 253504., с.6
2. Durach M., Noginova N. On the nature of the plasmon drag effect. *Physical Review B*. 2016. – Т. 93, №. 16. С. 161406., с.6
3. Nikulin E., Bandurin D., Svintsov D. Edge diffraction and plasmon launching in two-dimensional electron systems. arXiv preprint arXiv:2006.05200. – 2020., с. 6
4. Bylinkin A. et al. Tight-Binding Terahertz Plasmons in Chemical-Vapor-Deposited Graphene. *Physical Review Applied*. 2019 – Т. 11, №. 5, С. 054017., с. 5
5. Iranzo D. A. et al. Probing the ultimate plasmon confinement limits with a van der Waals heterostructure. *Science*. 2018. – Т. 360. №. 6386, С. 291-295., с.17

Плазмонные метаповерхности для усиления оптического отклика от двумерных материалов

Г.И. Целиков¹

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Двухмерные (2D) дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) привлекли к себе огромный научный интерес благодаря своим уникальным свойствам для разработки электронных и оптоэлектронных приборов нового поколения [1]. Хорошо изученные ДПМ группы-VI, включая MoS₂, WS₂, MoSe₂ и WSe₂, показали отличные характеристики для ряда потенциальных применений, таких как ультратонкие фотоприемники и светоизлучатели [2-3], элементы для электро- и фотокатализа [4], усиленная поверхность спектроскопия комбинационного рассеяния [5], сенсоры [6] и другие биомедицинские приложения [7]. Кроме того, их оптические свойства зависят от толщины слоёв. Так, резко возрастает сигнал фотолюминесценции (ФЛ) с уменьшением числа атомных слоёв, вплоть до монослоя, что связано с трансформацией зонной структуры [8]. Однако, низкий уровень оптического отклика ограничивает применение устройств на основе слоёв ДПМ [9]. Эта проблема может быть решена путем объединения ДПМ с плазмонными и диэлектрическими наноструктурами [10].

В данной работе мы демонстрируем реализацию ранее разработанной концепции фазо-чувствительных биосенсоров на основе дифракционно-связанных локализованных плазмонных резонансов [11] для усиления сигнала комбинационного рассеяния света от слоёв дисульфида молибдена MoS₂ толщиной до 10 нм. Для возбуждения дифракционно-связанных локализованных плазмонных резонансов были синтезированы массивы упорядоченных золотых наночастиц диаметром 100-150 нм с периодом 320 нм. Исследование изготовленных метаповерхностей методом спектральной эллипсометрии продемонстрировали резонансное поведение амплитуды и фазы отраженного от метаповерхности света в диапазоне 620-640 нм при освещении образца под углом 63°. При этом было обнаружено, что резонансное возбуждение локализованных плазмонных резонансов сопровождается усилением электромагнитного поля вблизи поверхности золотых наночастиц, что сопровождается усилением сигнала комбинационного рассеяния света слоем MoS₂, перенесённым на метаповерхность.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-79-00350

Литература

1. M. Chhowalla, H. S. Shin, G. Eda, L.-J. Li, K. P. Loh, H. Zhang, Nat. Chem. 5, 263-275 (2013).
2. O. Lopez-Sanchez, D. Lembke, M. Kayci, A. Radenovic; A. Kis, Nat. Nanotechnol. 8, 497-501 (2013).
3. J. S. Ross, P. Klement, A. M. Jones, N. J. Ghimire, J. Yan, D. G. Mandrus, T. Taniguchi, K. Watanabe, K. Kitamura, W. Yao, D. H. Cobden, X. Xu, Nature Nanotechnol. 9, 268-272 (2014).
4. A.B. Laursen, S. Kegnæs, S. Dahl, I. Chorkendorff, Energy Environ. Sci. 5, 5577-5591 (2012).
5. X. Ling, W. Fang, Y. H. Lee, P. T. Araujo, X. Zhang, J. F. Rodriguez-Nieva, Y. Lin, J. Zhang, J. Kong, M. S. Dresselhaus, Nano Lett. 14, 3033-3040 (2014).
6. J. B. Maurya, Y. K. Prajapati, V. Singh, Optical and Quantum Electronics 47, 1-13 (2015).
7. S. S. Chou, B. Kaehr, J. Kim, B. M. Foley, M. De, P. E. Hopkins, J. Huang, C. J. Brinker, V. P. Dravid, Angew. Chem. Int. Ed. 52, 4160-4164 (2013).
8. A. Krasnok, S. Lepeshov and A. Alú, Opt. Express 26 15972 (2018).
9. P. Tonndorf, R. Schmidt, P. Böttger, X. Zhang, J. Börner, A. Liebig, M. Albrecht, C. Kloc, O. Gordan, D.R.T. Zahn, S. Michaelis de Vasconcellos, R. Bratschitsch, Opt. Express 21, 4908 (2013).
10. Staude, T. Pertsch and Y. S. Kivshar, ACS Photonics 6, 802-814 (2019).
11. A. Danilov, G. Tselikov, F. Wu, V.G. Kravets, I. Ozerov, F. Bedu, A.N. Grigorenko, A.V. Kabashin, Biosensors and Bioelectronics 104, 102-112 (2018).

Плотность оптических состояний в нанорезонаторе с усилением

А.А. Вишневый

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Одной из важных задач современной нанофотоники является разработка интегрированных источников излучения на чипах [1], имеющих размеры сопоставимые или меньшие рабочей длины волны. Такие источники (нанолазеры) обладают массой потенциальных практических приложений, включая оптические межсоединения и сенсоры. Одним из их преимуществ является высокое быстродействие, связанное с высоким значением Парселл-фактора (отношение темпа спонтанного излучения возбужденного эмиттера в резонаторе к темпу излучения в объемной среде).

Общепринятым способом расчета темпа спонтанного и вынужденного излучения в нанолазерах является использование «золотого правила Ферми» [2]. Иные подходы [3] также во многом опираются на так называемое приближение слабой связи, т.е. считается, что в силу малости константы связи между усиливающей средой и резонатором, плотность состояний усиливающей среды и резонатора не изменяется. В данной работе с использованием диаграммной техники Келдыша показано, что это не так, ведь даже при слабом очень взаимодействии, количество эмиттеров, взаимодействующих с резонатором, велико, что приводит к «перестройке» плотности оптических состояний моды (см. рис. 1). При этом, в отличие от случая сильной связи, плотность уровней эмиттеров не изменяется. Плотность состояний в резонаторе определяет темп и спектр спонтанного излучения, а ее перестройка может привести к переходу резонатора из низкодобротного режима, когда характерная спектральная ширина моды резонатора превосходит таковую у эмиттеров, в высокодобротный.

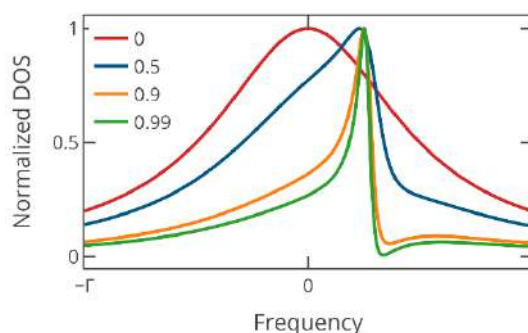


Рис. 1. Нормированная плотность оптических состояний в нанорезонаторе при различных степенях компенсации потерь при помощи дипольной однородно уширенной усиливающей среды.

Работа поддержана грантом РФФ 20-79-00349.

Литература

1. R.-M. Ma, R. Oulton, Applications of nanolasers. – Nat. Nanotech. – 2018 – 14 – 12–22.
2. B. Romeira, A. Fiore. Purcell Effect in the Stimulated and Spontaneous Emission Rates of Nanoscale Semiconductor Lasers. – IEEE Journal of Quantum Electronics – 2018 – 54 – 1–12.
3. Q. Gu, B. Slutsky, F. Vallini et al., Purcell effect in sub-wavelength metal-semiconductor lasers. – Optics Express – 2013 – 21 – 15603–15617.

УДК 533.922

Поверхностные плазмон-поляритоны в ультратонких металлических пленках

Д.В. Грудинин¹, Г.А. Ермолаев¹, Д.И. Якубовский¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Подробно изучены свойства поверхностных плазмон-поляритонов, распространяющихся в ультратонких плёнках золота. Образцы ультратонких золотых пленок получены электронно-лучевым осаждением золота в высоком вакууме на непрерывную пленку двумерного дисульфида молибдена [1-4]. Для этой цели мы использовали коммерческие подложки MoS₂/SiO₂/Si. Предварительная характеристика подложек осуществлялась с помощью атомно-силовой микроскопии, растровой электронной микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света.

Для измерения толщины и среднеквадратичной шероховатости ультратонких плёнок золота мы использовали атомно-силовую микроскопа. Морфология поверхности и сплошность пленок изучались с помощью растрового электронного микроскопа. Оптические свойства пленок определены

с помощью эллипсометрии в спектральном диапазоне от 300 до 3300 нм. Для изучения поверхностных плазмон-поляритонов (ППП) в ультратонких золотых пленках использовалась установка рассеивающей сканирующей ближнепольной оптической микроскопии (p-СБОМ, NeaSNOM, neaspec), позволяющая одновременно снимать данные по амплитуде и фазе распространяющихся поверхностных мод. Для возбуждения ППП использовался волоконный лазер телекоммуникационного диапазона длин волн 1475-1600 нм. Также авторами разработан алгоритм фильтрации от шумов изображений снимаемого ближнепольного сигнала. Получена зависимость относительного показателя преломления (и длины распространения) от длины волны для двух видов поверхностных плазмон-поляритонов (короткопробежные и длиннопробежные).

Полученные результаты свидетельствуют о возможности создания ультратонких металлических пленок (с толщинами менее 10 нм) для применений в плазмонике: продемонстрировано, что высококачественные (с разумными оптическими потерями) ультратонкие и ультрагладкие плёнки золота способны поддерживать поверхностные плазмон-поляритоны.

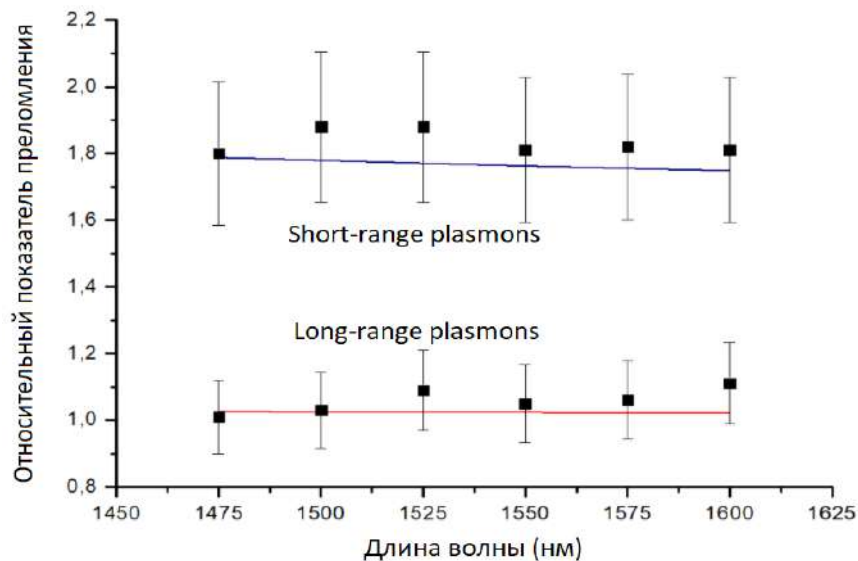


Рис. 1. Дисперсия поверхностных плазмон-поляритонов

Работа выполнена при частичной поддержке Минобрнауки России (0714-2020-0002) и РФФИ (18-37-20061, 18-29-02089 и 20-07-00840).

Литература

1. Yakubovsky D. I. et al. Ultrathin and ultrasmooth gold films on monolayer MoS₂ // *Advanced Materials Interfaces*. 2019. V. 6. P. 1900196.
2. Volkov V.S. et al. Ultra-thin gold films: Towards 2D metals for photonic and optoelectronic applications // *Journal of Physics: Conference Series*. 2020. V. 1461. P. 012184.
3. Yakubovsky D.I. et al. Morphology and effective dielectric functions of ultra-thin gold films // *Journal of Physics: Conference Series*. 2018. V. 1092. P. 012167.
4. Yakubovsky D.I. et al. Near-field characterization of ultra-thin metal films // *Journal of Physics: Conference Series*. 2020. V. 1461. P. 012193.

УДК 535.016

Поверхностный плазмонный резонанс в CVD графене для увеличения фотопоглощения в ИК диапазоне

Е.И. Титова¹, А.Н. Былинкин¹, М.А. Кащенко¹, В.В. Михеев¹, Д.А. Свинцов¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Фотодетекторы на основе графена демонстрируют сверхбыстрый отклик, обеспечиваемый высокой подвижностью электронов [1]. Но графен слабо поглощает внешнее излучение, что ограничивает чувствительность таких детекторов. Один из возможных вариантов увеличения чувствительности - концентрация излучения вблизи графена. Возбуждение поверхностного плазмонного

резонанса (ППР) в графене позволяет концентрировать электромагнитное поле в масштабы намного меньше длины волны излучения в свободном пространстве, что значительно увеличивает поглощение электромагнитного излучения. Фотодетектирование с использованием ППР уже наблюдалось ранее в высококачественном графене: в эпитаксиальном графене на SiC [2], а также в инкапсулированном графене, полученным методом механического отщепления [3]. В данной работе мы демонстрируем ППР в более доступном и масштабируемом графене, полученном методом химического осаждения из газовой фазы (CVD) в диапазоне 5-10 ТГц.

В рамках данной работы были изготовлены транзисторные структуры с однослойным CVD-графеном в качестве канала транзистора, золотыми электродами в качестве стока/истока, и кремниевой подложкой в качестве нижнего затвора. Для возбуждения ППР в графене использовались металлические решетки, напыленные поверх стека графен/диэлектрик, как показано на рис.1 (а). Металлическая решетка с минимальными размерами порядка 130 нм и толщиной 15 нм была изготовлена методами электронной литографии и электронно-лучевого напыления металлов.

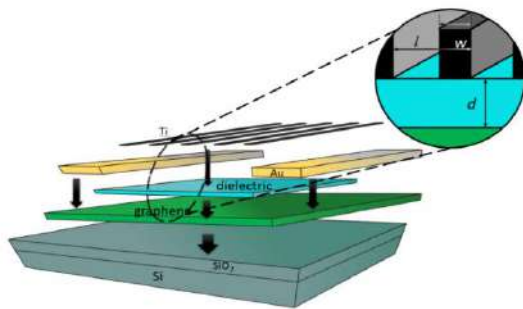
Спектры пропускания данных транзисторных структур были измерены с помощью Фурье-спектрометра Bruker Vertex 80v в спектральном диапазоне от 50 до 450 см⁻¹. Во время спектроскопических измерений также варьировалась и контролировалась проводимость графена с помощью напряжения на нижнем затворе.

$$A = 1 - \frac{T(V_G)}{T_{CNP}},$$

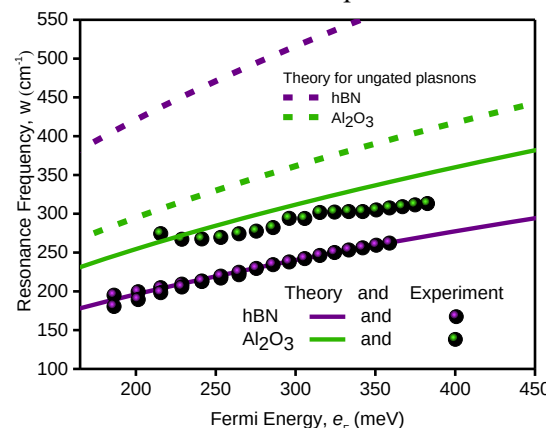
Пренебрегая отражением и рассеянием излучения, поглощение образца равно где T_{CNP} - пропускание графена в точке электронейтральности. Измерения проводились при двух различных поляризациях излучения: параллельно и перпендикулярно металлической решетке. При этом в первом случае наблюдалось только Друде-поглощение в графене, тогда как во втором случае возбуждался ППР.

Исследовав зависимость резонансных частот от энергии Ферми в графене (рис. 1 (b)) мы обнаружили, что ранние теории [4] плохо описывают данную зависимость. Во-первых, значения резонансных частот лежат значительно ниже частоты негейтированного графенового плазмона, вычисленного с использованием волнового вектора обратной решетки $G_{n=1} = 2\pi/l$, где l – период решетки. Во-вторых, резонансные частоты не зависят от периода возбуждающей плазмоны решетки, но зависят от длины металлических полос в ней. Нами была разработана модель дисперсии гейтированных плазмонов в графене [5], которая воспроизводит экспериментальные данные без каких-либо подгоночных параметров. По-видимому, сильное отражение плазмонов от границ металлических полос в закрытой и открытой областях графена приводит к локализации поля под металлическими полосками. Спектр плазмонов в структуре становится подобным электронному спектру в модели сильной связи.

Данные результаты показывают перспективность CVD графена для детектирования инфракрасного излучения. Мы продолжаем дальнейшие исследования в данном направлении.



(а)



(b)

Рис. 1 (а) Схематическое изображение структуры на основе CVD графена. (b) Точки – экспериментально измеренные значения резонансных частот, сплошные линии – теоретический расчет закона дисперсии гейтированных плазмонов: с гексагональным BN (фиолетовый цвет) и Al₂O₃ (зеленый) в качестве верхнего диэлектрика. Пунктирными линиями показаны теоретически рассчитанные спектры негейтированных плазмонов.

Литература

1. X. Gan, R.-J. Shiue, Y. Gao, I. Meric, T.F. Heinz, K. Shepard, J. Hone, S. Assefa, D. Englund “Chip-integrated ultrafast graphene photodetector with high responsivity”, *Nature Photonics*, 7, pages 883–887 (2013) M. P. Brown and K. Austin, *Appl. Phys. Letters* 85, 2503–2504 (2004).
2. X. Cai, A.B. Sushkov, M. M. Jadidi, L.O. Nyakiti, R.L. Myers-Ward, D.K. Gaskill, T.E. Murphy, M.S. Fuhrer, H.D. Drew, “Plasmon-Enhanced Terahertz Photodetection in Graphene”, *Nano Lett.*, 15 (7), 4295–4302 (2015). B. R. Jackson and T. Pitman, U.S. Patent No. 6,345,224 (8 July 2004)
3. D.A. Bandurin, D. Svintsov, I. Gayduchenko, S.G. Xu, A. Principi, M. Moskotin, I. Tretyakov, D. Yagodkin, S. Zhukov, T. Taniguchi, K. Watanabe, I.V. Grigorieva, M. Polini, G.N. Goltsman, A.K. Geim, G. Fedorov, “Resonant terahertz detection using graphene plasmons”, *Nature Communications*, 9, 5392 (2018).
4. S. A. Mikhailov “Plasma instability and amplification of electromagnetic waves in low-dimensional electron systems” *Phys. Rev. B* 58, 1517 (1998).
5. A. Bylinkin, E. Titova, V. Mikheev, E. Zhukova, S. Zhukov, M. Belyanchikov, M. Kashchenko, A. Miakonkikh, D. Svintsov, “Tight-binding terahertz plasmons in chemical vapor deposited graphene”; *Phys. Rev. Applied*, 11, 054017, May 2019

УДК 537.9

Прозрачная электроника на основе ультратонких металлических пленок

А.В. Арсенин¹, Г.А. Ермолаев¹, Д.И. Якубовский¹, Ю.В. Стебунов¹, В.С. Волков¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Гибкие прозрачные электроды представляют значительный интерес для различных приложений, включая солнечные элементы, светодиоды, жидкокристаллические, сенсорные и прозрачные экраны, умные контактные линзы и многое другое. Сочетание высокой оптической прозрачности, высокой электропроводности и гибкости предъявляет жесткие требования к материалам для таких электродов. Несмотря на значительные усилия научного сообщества и лидеров электронной индустрии до настоящего времени задача создания прозрачных, проводящих и гибких электродов с высокими потребительскими свойствами в рамках современных технологических процессов не решена в полной мере. В настоящее время прозрачные электроды изготавливаются на основе редких и дорогих металлов, таких как индий (необходим для производства оксида индия и олова (ITO)), и их производство осуществляется с использованием самых передовых и дорогих технологий. Предлагаются различные альтернативы для решения этой задачи, например, электроды на основе металлических углеродных нанотрубок, графена, серебряных нанонитей, ультратонкие металлические пленки в окружении оксидов и др. Для ряда приложений, где требуется низкая шероховатость проводников, например, для умных контактных линз, ультратонких и прозрачных дисплеев высокого разрешения, эти решения не применимы.

В докладе рассматриваются вопросы создания нового поколения прозрачных, гибких и проводящих электродов на основе ультратонких (толщиной менее 5 нм) и ультрагладких (с шероховатостью менее 5 Å) металлических пленок (золота, серебра, меди и алюминия) на интерфейсах из двумерных материалов (дихалькогениды переходных металлов, гексагональный нитрид бора). Для осаждения ультратонких металлических пленок предлагается использовать стандартные технологии физического осаждения металлов из газовой фазы, при этом кинетика ультратонких атомарно гладких металлических пленок будет определяться интерфейсами из двумерных материалов. Помимо технологий синтеза ультратонких и ультрагладких металлических пленок представлены предварительные результаты по достигнутым оптическим и электрическим свойствам для ультратонких и ультрагладких золотых пленок [1-4].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (18-07-01339 и 20-07-00840).

Литература

1. Yakubovsky D. I. et al. Ultrathin and ultrasmooth gold films on monolayer MoS₂ // *Advanced Materials Interfaces*. 2019. V. 6. P. 1900196.
2. Volkov V.S. et al. Ultra-thin gold films: Towards 2D metals for photonic and optoelectronic applications // *Journal of Physics: Conference Series*. 2020. V. 1461. P. 012184.
3. Yakubovsky D.I. et al. Morphology and effective dielectric functions of ultra-thin gold films // *Journal of Physics: Conference Series*. 2018. V. 1092. P. 012167.

4. Yakubovsky D.I. et al. Near-field characterization of ultra-thin metal films // Journal of Physics: Conference Series. 2020. V. 1461. P. 012193.

УДК 546.05

Разработка электрохимического подхода к синтезу оксида графена

¹А.В. Кирьянова, ¹С. Сюй, ^{1,2}О.О. Капитанова

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет).

В настоящее время оксид графена является высоко востребованным материалом. Его рассматривают в ряде научных и прикладных задач в качестве прекурсора для химического синтеза графена при создании осушительных мембран, сорбентов, проводящей добавки в электродных материалах аккумуляторов и сенсорных систем. Наиболее распространенным способом получения оксида графена является метод Хаммерса [1]. Однако, использование концентрированной серной кислоты и перманганата калия делает его экологически небезопасным. Альтернативным является метод электрохимического окисления графита [2]. Он более экологичен, но имеет ряд недостатков: низкий выход по 1-3-слойным частицам и низкая степень окисления оксида графена. Хотя для некоторых применений (например, газоосушающих мембран) необходимо наличие кислородных групп [3]. Поэтому данный метод требует дальнейшего изучения и оптимизации.

Электрохимическое получение оксида графена проводили в трехэлектродных ячейках, в которых в качестве катода использовали платину, в качестве анода – пластины графита. В качестве электролита использовали растворы слабых органических кислот в присутствии гидроксида калия (например, 0,05М РТА+0,28 М КОН), повышающего кислотность и растворимость органической кислоты. Синтез осуществляли в потенциостатическом режиме в диапазоне напряжений от 2 В до 10В относительно хлорсеребряного электрода. В результате были получены золи оксида графена насыщенного коричневого цвета (до 2 мг/мл), которые подвергали центрифугированию с последующей очисткой от остаточных продуктов реакции методом диализа. Морфологию полученных образцов исследовали методами АСМ, СЭМ и КР-спектроскопии, а состав с помощью ИК- и РФЭ-спектроскопий, соответственно.

В процессе работы было установлено, что напряжение окисления определяет латеральный размер частиц и их толщину, но практически не влияет на степень окисления образцов. Содержание дефектов в конечном продукте зависит от состава электролита. Оптимальное напряжение для электрохимического получения оксида графена в щелочном растворе фталевой кислоты составило 6,6 В. Данные условия синтеза позволяют получать нанолисты оксида графена с латеральным размером от сотен нм до нескольких мкм с толщиной от 1 до 3х слоев преимущественно. Использование линейных аминокислот позволило получить сплошные частицы оксида графена, в то время как использование ароматических карбоновых кислот – частицы с развитой системой пор (рис.1). По результатам РФЭС соотношение С:О для образца, полученного при напряжении 6,6 В, составляет 7,8, что указывает низкую степень окисления оксида графена в сравнении с химическими методами синтеза. Поэтому синтезированный материал не требует дальнейшего восстановления в качестве проводящей добавки. Следующим этапом работы является подбор условий для варьирования степени окисления графеноподобных частиц в зависимости от выбора электролита и электрохимических параметров синтеза.

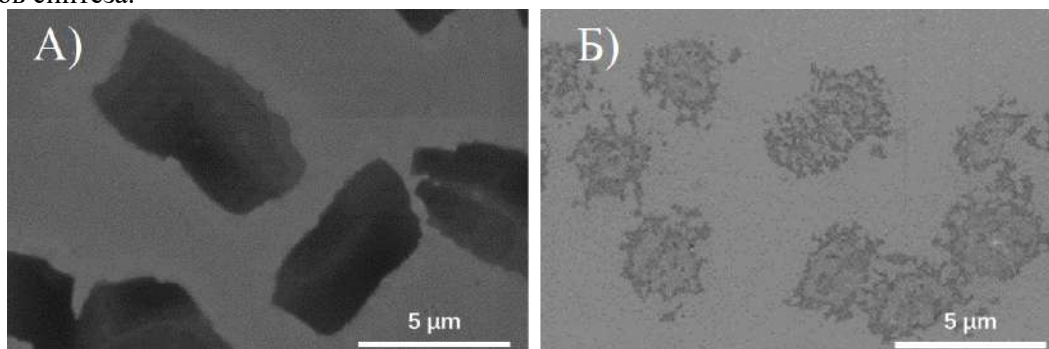


Рис.1 Микрофотографии РЭМ оксида графена, полученного электрохимическим методом в электролите, содержащем: А) линейную органическую кислоту ;
Б)ароматическую органическую кислоту
Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-33-70264

Литература

1. Hummers, W.S., Offeman, R.E. Preparation of Graphitic Oxide. // Journal of the American Chemical Society. 1958. V.80. N.6. P.1339.
2. Wang, H.S., Tian, S.Y., Yang, S.W., Wang, G., You, X.F., Xu, L.X. et al. Anode coverage for enhanced electrochemical oxidation: a green and efficient strategy towards water-dispersible graphene. // Green Chemistry. 2018. V.20. N.6. P.1306–1315.
3. Чернова Е. А., Капитанова О. О., Кирьянова А. В., Петухов Д. И., Лукашин А. В., Елисеев А.А. Композиционная мембрана для осушения газовых смесей с селективным слоем на основе оксида графена, содержащим наноленты оксида графена между нанолитами оксида графена. 2020.

УДК 535.215.4

Сверхбыстрый детектор дальнего ИК диапазона на основе графена

Д.А. Мыльников, В.А. Сёмкин, Е.И. Титова, Д.А. Свинцов, Г.Е. Федоров

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Дальний инфракрасный диапазон (6-12 мкм), в отличие от видимого, характеризуется малым разнообразием коммерческих фотодетекторов, т.к. у большинства полупроводников запрещенная зона больше, чем энергия кванта этого диапазона, составляющая 0.1 эВ. В основном это тепловые детекторы (болометры, микроболометры и термпары), имеющие хорошую обнаружительную способность $D^* = 10^8 \text{ см} \cdot \text{Гц}^{1/2} / \text{Вт}$, но медленный отклик (порядка мс) и детекторы на структурах кадмий-ртуть-теллур, являющиеся быстрыми (время отклика до нескольких наносекунд), но требующие охлаждения для достижения таких же высоких значений D^* , что сказывается на габаритах и цене [1-2]. Поэтому фотодетекторы дальнего ИК диапазона на новых двумерных материалах представляют исключительный интерес.

В данной работе исследована работа фотодетектора на основе графена, осажденного из газовой фазы в области длин волн 6-10 мкм. Детектор представляет собой однослойную графеновую пленку с двумя металлическими контактами заданной формы из одного или двух разных металлов. Образцы изготавливались следующим образом. Графен переносится с медной подложки на кремниевую со слоем оксида толщиной 100-600 нм, паттернируется. Затем на каждое устройство напыляется пара металлических контактов хром - золото.

Детектор был исследован в режиме работы без смещения и со смещением. Было показано, что без приложения внешнего напряжения наблюдается генерация напряжения на р-п переходах графен-металл посредством термоэлектрического эффекта [3-5]. Для этого была измерена зависимость фотонапряжения от энергии Ферми графена, которая изменялась с помощью затвора (рис. 1). Зависимость очень близка к зависимости термоэлектрического коэффициента графена от энергии Ферми [6].

Измеренная скорость нарастания и падения фотонапряжения до уровня $1/e$ составила единицы мкс (рис. 2), при этом было показано, что она ограничивается параметром $\tau = RC$ электрической цепи, где сопротивление сконцентрировано в графеновой пленке, которое может быть легко уменьшено изменением отношения ее длины к ширине, а емкость сконцентрирована в металлических контактных площадках, площадь которых может быть также уменьшена на несколько порядков. Мы предполагаем, что за счет уникального свойства графена - слабой связи электронов в графене с фононами решетки, которое позволяет быстро нагревать электроны излучением без обмена тепла с решеткой, внутренняя скорость работы детектора должна составлять пикосекунды [7-10]. Это было ранее подтверждено в видимом диапазоне длин волн [11-13].

Измерения чувствительности проводились на пленках графена, имеющих простую квадратную или прямоугольную форму. С помощью расчетов и моделирования было показано, что объединение одиночных детекторов в сверхструктуры, состоящие из множества последовательно и параллельно соединенных устройств на площади менее дифракционного предела, который для этого диапазона примерно равен 20 мкм, позволяет повысить обнаружительную способность в 50 раз. При

этом комбинирование данного подхода с одновременным изменением формы отдельных устройств для концентрации электромагнитной энергии в фоточувствительной области с помощью плазмонных или оптических резонансов позволяет достичь $D^* = 10^9 \text{ см} \cdot \text{Гц}^{1/2} / \text{Вт}$. В качестве одного из вариантов такого устройства была рассчитана сверхструктура из металлических дипольных антенн с графеном в промежутке, настроенных на оптический резонанс с падающим светом.

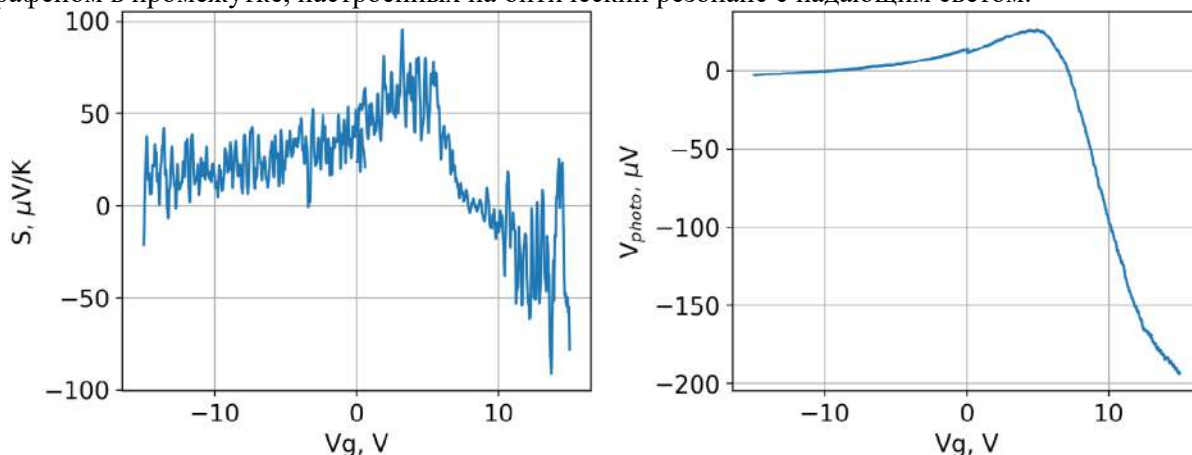


Рис. 1. Слева – термоэлектрический коэффициент графена, рассчитанный из экспериментальной зависимости проводимости графена от затвора, справа – зависимость фотонапряжения от затвора.

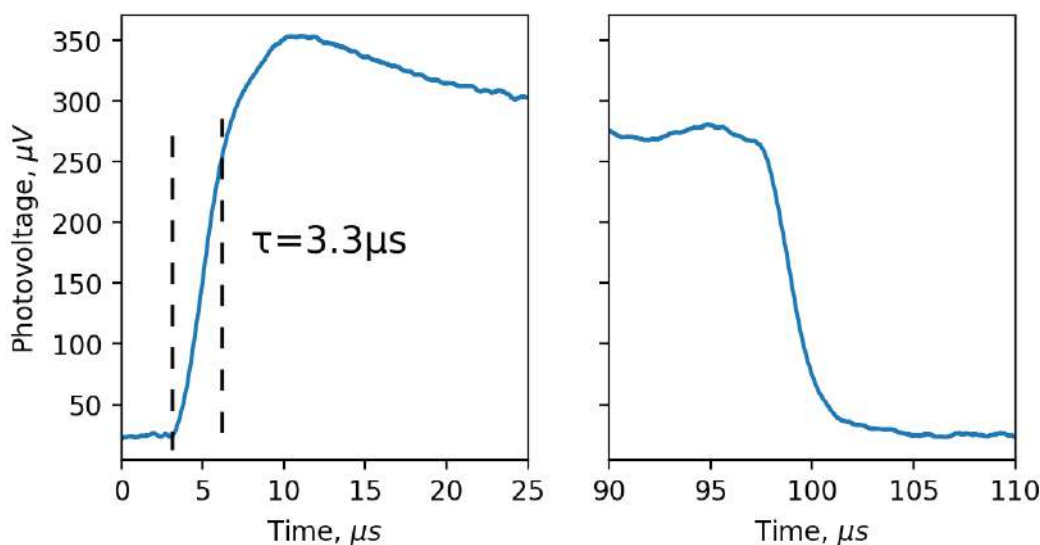


Рис. 2. Скорость нарастания и падения фотонапряжения графенового фотодетектора при включении и выключении квантово-каскадного лазера.

Литература

1. Rogalski A. Recent progress in infrared detector technologies // *Infrared Physics & Technology* 2011. V. 54. P. 136.
2. Rogalski A. *Infrared Detectors*. - Boca Raton: CRC Press, 2010.
3. Echtermeyer T.J., Nene P.S., Trushin M., Gorbachev R.V., Eiden A.L., Milana S., Sun Z., Schliemann J., Lidorikis E., Novoselov K.S. & Ferrari A.C. Photothermoelectric and Photoelectric Contributions to Light Detection in Metal–Graphene–Metal Photodetectors // *Nano Lett.* 2014. V. 14. P. 3733.
4. Freitag M., Low T., Xia F. & Avouris P. Photoconductivity of biased graphene // *Nature Photon* 2013. V. 7. P. 53.
5. Gabor N.M., Song J.C.W., Ma Q., Nair N.L., Taychatanapat T., Watanabe K., Taniguchi T., Levitov L.S. & Jarillo-Herrero P. Hot Carrier–Assisted Intrinsic Photoresponse in Graphene // *Science* 2011. V. 334. P. 648.
6. Song J.C.W., Rudner M.S., Marcus C.M. & Levitov L.S. Hot Carrier Transport and Photocurrent Response in Graphene // *Nano Lett.* 2011. V. 11. P. 4688.
7. Gruber E., Wilhelm R.A., Pétuya R., Smejkal V., Kozubek R., Hierzenberger A., Bayer B.C., Aldazabal I., Kazansky A.K., Libisch F., Krashennnikov A.V., Schleberger M., Facsko S., Borisov A.G., Arnau A. & Aumayr F. Ultrafast electronic response of graphene to a strong and localized electric field // *Nature Communications* 2016. V. 7. P. 13948.

8. Tielrooij K.J., Piatkowski L., Massicotte M., Woessner A., Ma Q., Lee Y., Myhro K.S., Lau C.N., Jarillo-Herrero P., van Hulst N.F. & Koppens F.H.L. Generation of photovoltage in graphene on a femtosecond timescale through efficient carrier heating // *Nature Nanotechnology* 2015. V. 10. P. 437.
9. Song J.C.W., Reizer M.Y. & Levitov L.S. Disorder-Assisted Electron-Phonon Scattering and Cooling Pathways in Graphene // *Phys. Rev. Lett.* 2012. V. 109. P. 106602.
10. Low T., Perebeinos V., Kim R., Freitag M. & Avouris P. Cooling of photoexcited carriers in graphene by internal and substrate phonons // *Phys. Rev. B* 2012. V. 86. P. 045413.
11. Cai X., Sushkov A.B., Suess R.J., Jadidi M.M., Jenkins G.S., Nyakiti L.O., Myers-Ward R.L., Li S., Yan J., Gaskill D.K., Murphy T.E., Drew H.D. & Fuhrer M.S. Sensitive room-temperature terahertz detection via the photothermoelectric effect in graphene // *Nature Nanotechnology* 2014. V. 9. P. 814.
12. Mueller T., Xia F. & Avouris P. Graphene photodetectors for high-speed optical communications // *Nature Photonics* 2010. V. 4. P. 297.
13. Xia F., Mueller T., Lin Y., Valdes-Garcia A. & Avouris P. Ultrafast graphene photodetector // *Nature Nanotechnology* 2009. V. 4. P. 839.

УДК 535.343.9

Свойства переключаемых модуляторов суб-ТГц/ТГц излучения на основе метаповерхностей из VO₂ и Au

А.С. Славич¹, С.С. Жуков¹, И.К. Домарацкий¹, М.Е. Кутенов², Е.М. Кайдашев², В.Е. Кайдашев¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Южный федеральный университет

Метаповерхности на основе массивов металлических антенн позволяют изготавливать различные фильтры для излучения суб-ТГц/ТГц диапазона. В частности, на основе массивов антенн “bow-tie” (бабочка) изготавливают фильтры с минимумом пропускания около ~5% вблизи ~1 ТГц, резонансная частота и ширина полосы поглощения которого определяется геометрией антенн [1]. Метаповерхности, элементы которых изготовлены из VO₂ предоставляют дополнительную гибкость функциональности по сравнению с металлическими структурами со статическим спектром пропускания [2]. Действительно, VO₂ широко изучается из-за его уникальных электронных свойств, позволяющих осуществлять сверхбыстрое переключение проводимости более чем на 4 порядка [3]. Таким образом, электрическими свойствами всего массива антенн из VO₂ или его отдельных элементов можно управлять с помощью нагрева [4], облучения лазерным излучением УФ/видимого/ближнего ИК диапазона [5], при помощи пропускания тока/высоких электромагнитных локальных полей [6,7] или даже интенсивного ТГц излучения [8].

В данной работе нами были изучены свойства переключаемых модуляторов суб-ТГц/ТГц излучения на основе метаповерхностей из эпитаксиальных пленок VO₂ и Au, изображенных на Рис.1а. В результате термического нагрева выше температуры фазового перехода ~68°C или при облучении лазерным излучением видимого/ближнего ИК диапазона проводимость пленки VO₂ изменяется от полупроводниковой до металлической, в результате чего пропускание в суб-ТГц/ТГц диапазоне уменьшается с ~33% до ~6% вблизи 1 ТГц (Рис.1б).

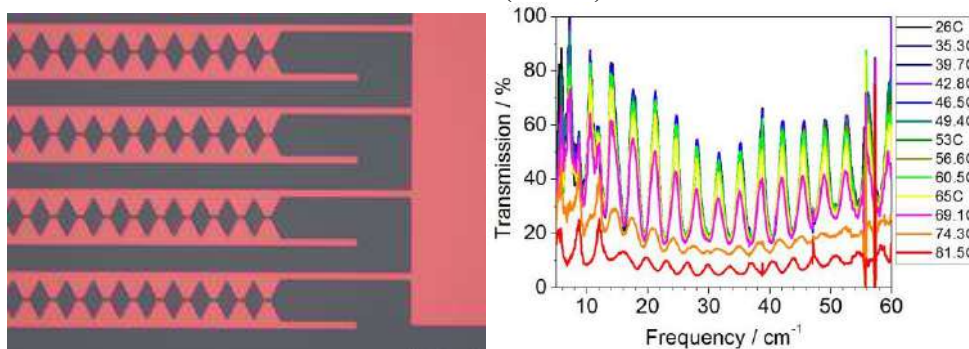


Рис. 1. Изображение метаповерхности из Au и VO₂ (а) и спектры суб-ТГц/ТГц пропускания плёнки VO₂ при разных температурах (б).

Свойства пропускания модуляторов суб-ТГц/ТГц излучения на основе VO₂ и Au изучены в зависимости от температуры подложки и от приложенной разности потенциалов, снижающей порог

термического переключения. Также изготовлены аналогичные метаповерхности из массивов Au антенн-бабочек и проведено сравнение их ТГц свойств со свойствами метаповерхностей на основе VO₂/Au.

Изученные метаповерхности будут использованы для построения переключаемых новых устройств фильтрации/модуляции волн суб-ТГц/ТГц диапазона.

Изготовление эпитаксиальных пленок VO₂ выполнено при поддержке гранта Южного Федерального университета № 07/2020-06-ММ. Изготовление метаповерхностей проводилось на оборудовании ЦКП МФТИ при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования РФ № RFMEFI59417X0014 и гранта РНФ № 16-19-10557. Изучение свойств метаповерхностей проводилось при финансовой поддержке проекта РФФИ №18-02-00151А.

Литература

1. Dong R. et al., Plasmonic resonance of bowtie antennas and their geometry dependence // Proc. SPIE 2012. V 8562.
2. Yaxin Z. et al., Terahertz smart dynamic and active functional electromagnetic metasurfaces and their applications // Phil. Trans. R. Soc. A. 2020. V 378.
3. Wen H. et al., Structural and electronic recovery pathways of a photoexcited ultrathin VO₂ film // Phys. Rev. B. 2013. V 88. P. 165424.
4. Q. He et al., Tunable/Reconfigurable Metasurfaces: Physics and Applications, AAAS Research 2019, 1849272
5. A.Cavalleri et al., Evidence for a structurally-driven insulator-to-metal transition in VO₂: A view from the ultra-fast timescale, Phys. Rev. B 70 (2004) 161102
6. Han C. et al., Broadband modulation of terahertz waves through electrically driven hybrid bowtie antenna-VO₂ devices // Sci Rep. 2017. V 7. P. 12725.
7. Wei J. et al., New aspects of the metal-insulator transition in single-domain vanadium dioxide nanobeams Nat. Nanotechnol. 4 (2009) 420
8. Thompson Z. J. et al., Terahertz-Triggered Phase Transition and Hysteresis Narrowing in a Nanoantenna Patterned Vanadium Dioxide Film, Nano Lett. 2015, 15, 5893

УДК 533.937

Спин-фононное взаимодействие и магноны в монокристалле LiNiPO₄

С.А. Климин¹, М.С. Радионов^{1,2}, А.В. Песчанский³

¹Институт спектроскопии Российской академии наук

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины

Интерес научного сообщества к группе кристаллов LiMPO₄ с различными ионами M (Fe, Co, Ni) вызван, по крайней мере, двумя причинами. Во-первых, благодаря особенностям кристаллической структуры подвижные ионы Li⁺ могут свободно перемещаться. Этот кристалл является ионным проводником и может быть использован в качестве материала катодов литий-ионных батарей [1,2], причем окислительно-восстановительный потенциал LiNiPO₄ выше, чем у других соединений этой группы, что может повысить емкость аккумуляторов и одновременно понизить их стоимость [3]. Во-вторых, кристаллические соединения группы LiMPO₄ являются низкотемпературными магнетиками [4,5], у которых проявляются мультиферроидные свойства.

Двойные фосфаты LiMPO₄ кристаллизуются в пространственной группе Pnma (№62) [6,7]. При температуре около 20K (в отсутствие магнитного поля) в кристалле LiNiPO₄ происходит антиферромагнитное упорядочение [8,9]. Учитывая, что в мультиферроиках наблюдаются сильные эффекты взаимодействия различных подсистем, представляет интерес обнаружения особенностей в поведении фононного спектра вблизи температуры магнитного упорядочения. Задачей данной работы являлось измерение спектров ИК-отражения в поляризованном свете при низких температурах.

Спектры отражения LiNiPO₄ были измерены на Фурье-спектрометре BRUKER IFS125, образец находился в оптическом гелиевом криостате замкнутого цикла CryoMech ST403.

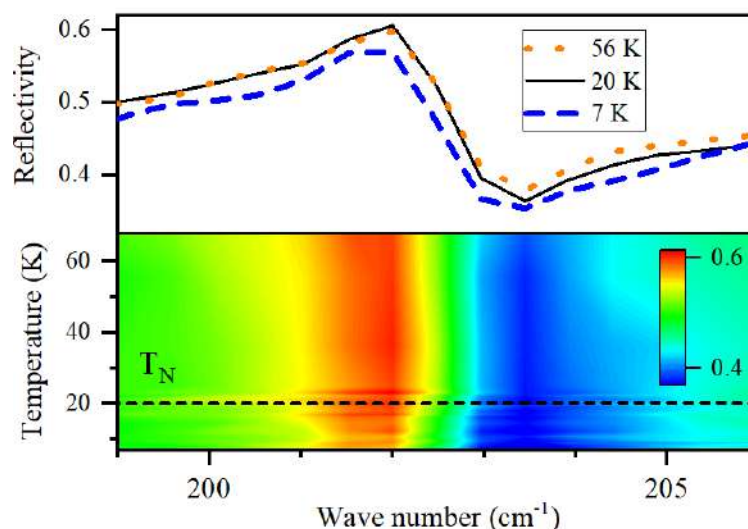


Рис. 1. Спектры отражения монокристалла LiNiPO_4 в поляризации $E||b$ при различных температурах и карта интенсивностей.

На рис. 1. приведен спектр отражения в области фонона 202 см^{-1} и карта интенсивностей, на которой видно резкое смещение частоты фонона на величину порядка 0.3 см^{-1} при температуре фазового перехода (21.8 K), что можно считать свидетельством присутствия спин-фононного взаимодействия. Поскольку при температурах ниже 150 K в низкочастотной области появляется окно прозрачности, то интенсивность регистрируемого сигнала растет за счет отражения от второй грани кристалла. А при температурах меньших температуры фазового перехода, луч, дважды проходящий сквозь образец, поглощается, в том числе и из-за магнитных возбуждений. Нам удалось обнаружить линии поглощения, соответствующие поглощению на частотах магнитных возбуждений. Полученные результаты сведены в Таблице 1, где они сравниваются с результатами, приведенными в литературе.

	Эксперимент [данная работа]	Эксперимент [5]	Тип магнитных возбуждений [5]	КРС [10]
ν_1	-	16,1	Магнитодипольный	
ν_2	36	36,2	Магнитодипольный	36,3
ν_3	48	48,4	Магнитодипольный	49.2
ν_4	-	54,8	Очень слабый	
ν_5	58	56,4	Электромагنون	56.5
ν_6		66,4	Двухмагнетонное возбуждение	66
ν_7	60-120	60-120	Двухмагнетонное возбуждение	60-120

Таб. 1. Сравнение частот магнонов (см^{-1}), полученных в эксперименте с литературными данными.

Литература

1. Karthickprabhu S. [et al.] // Mater. Lett. 2019. V. 237. P. 224-227.
2. Ornek A. [et al.] // Chem. Eng. J. 2018. V. 331. P. 501-509.
3. Shang S.L. [et al.] // J. Materials Chemistry. 2012. V. 22. P. 1142.
4. Lewinska S. [et al.] // Phys. Rev. 2019. V. 99. P. 214440.
5. Peedu L. [et al.] // Phys. Rev. B. 2019. V. 22. P. 1142.
6. Abrahams I. [et al.] // Acta Crystallogr. Sect. C. 1993. V. 49. P.925-926.
7. Li J. [et al.] // Phys. Rev. B. 2009. V. 79.P.1-7.
8. Santoro R.P. [et al.] // J. Phys. Chem. Solids. 1966. V. 27. P. 1192-1193.
9. Vaknin D. [et al.] // Phys. Rev. B. 1999. V. 60. P. 1100-1110.
10. Peschanskii A.V. // Low Temp. Phys. 46, 622 (2020)

Температурная зависимость оптоэлектронных свойств нанолент трисульфида титана

С.М. Раджам¹, П. Мишра¹, А.В. Арсенин¹, В.С. Волков¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Трисульфид титана (TiS_3) – это перспективный слоистый полупроводниковый материал из семейства двумерных халькогенидов переходных металлов [1]. Для TiS_3 характерна сильная зависимость подвижности носителей от температуры [2]. В рамках настоящей работы для создания прототипа фотодетектора на основе TiS_3 мы используем диэлектрофорез, который позволяет осуществлять направленную сборку жидкофазных отслоенных одиночных нанолент TiS_3 . Для изготовленного прототипа фотодетектора исследована температурная зависимость вольт-амперных характеристик в диапазоне температур от 80 до 400 К.

Наши исследования показывают, что на интервале низких температур (80 – 180 К) сопротивление TiS_3 резко возрастает с понижением температуры, тогда как свыше 180 К при увеличении температуры сопротивление медленно падает по линейному закону. Мы также изучили температурную зависимость фототока при воздействии лазера с длиной волны 1064 нм. Регистрируемый детектором фототок первоначально увеличивается с повышением температуры, однако при высокой температуре измерение увеличения фототока затруднено из-за рассеяния носителей заряда. Рабочая температура поддерживалась контроллером температуры Linkam T95-PE, оснащенный камерой отбора проб.

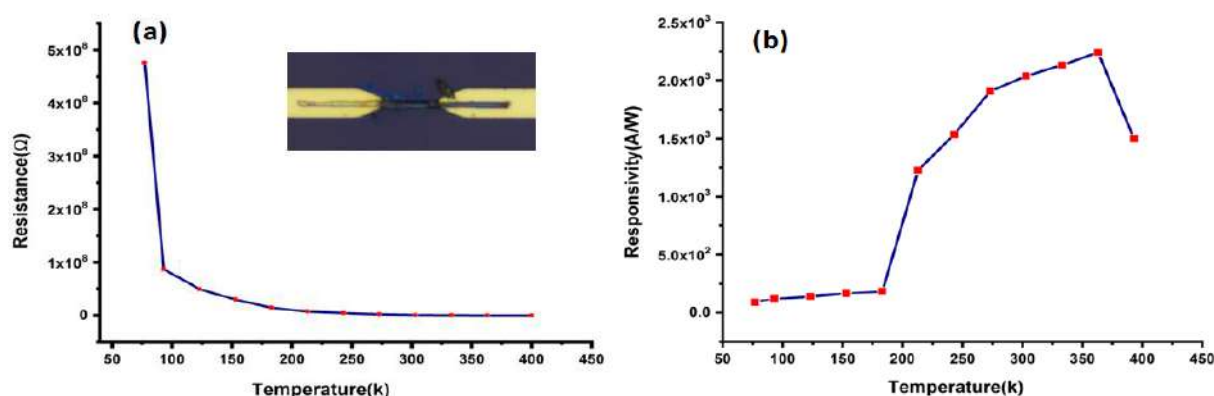


Рис. 1 (а) Изменение сопротивления в зависимости от температуры (вставка: оптическое изображение выровненной наноленты TiS_3 между золотыми электродами) и (б) температурная зависимость чувствительности фототока в диапазоне температур от 80 до 400 К при воздействии лазерного излучения на длине волны 1064 нм.

Как показано на вставке рисунка 1(а), наноленты TiS_3 были выровнены между золотыми электродами на подложке SiO_2/Si методом диэлектрофореза.

При низкой температуре неожиданно низкое сопротивление вызывает нелинейность вольт-амперных характеристик. Также наблюдается сдвиг в базовом токе. График зависимости чувствительности от температуры фотоприемника приведен на рисунке 1 (б). Эта нелинейная температурная зависимость чувствительности при низких температурах наблюдается и для других двумерных электронных систем и согласуется с полупроводниковой природой TiS_3 .

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России (0714-2020-0002).

Литература

1. Talib M., Tabassum M., Islam S. S., Mishra P. Influence of growth temperature on titanium sulphide nanostructures: from trisulphide nanosheets and nanoribbons to disulphide nanodiscs // RSC Adv., 2019, 9, 645-657.
2. Randle M., Lipatov A., Kumar A., Kwan C.-P., Nathawat J., Barut B., Yin S., Arabchigavkani K. He, N., Dixit R., Komesu T., Avila J., Asensio M.C., Dowben P.A., Sinitskii A., Singiset U. i, Bird J. P., Gate-Controlled Metal-Insulator Transition in TiS_3 Nanowire Field-Effect Transistors // ACS Nano 2019, 13, 1, 803-811.

Тепловизионный контроль температуры источников питания светодиодных фито-модулей

М.А. Романова¹, Т.Ю. Замаева²

¹Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН (ИПУ РАН)

²ООО «Трион»

Представлены результаты использования тепловизора для контроля температуры корпусов полупроводниковых светодиодных фито-модулей при эксплуатации их в условиях тепличного хозяйства. Поддержание оптимальной температуры светодиодных светильников и модулей, основа для их долгой и безотказной работы [1,2]. Как показывают результаты длительных испытаний модулей в реальных условиях, например в тепличном хозяйстве, при длительных сроках работы, более важным является не температура полупроводниковых источников света, а температура источника питания. Высокая влажность и повышенные температуры их эксплуатации существенно уменьшают срок работы. Поэтому важное значение приобретает непрерывный контроль температуры корпуса источника питания. Для этого на фирме ООО «Трион» применяется тепловизионный контроль, используя инфракрасные тепловизоры RGK модели TL-80. При этом производится измерение пространственного распределения радиационных температур объектов. Разница в физических и химических свойствах материалов влияет на их отражательную способность ИК-излучения и поглощающую способность. Это позволяет формировать карту распределения лучистой температуры, связывая конкретный цвет и каждый пиксель изображения с определенным значением температуры [3]. А более детальная обработка карты радиационных температур позволяет кластеризовать объекты мониторинга и получать информацию об их составе.

Измерения температуры проводятся в реальных условиях, при размещении корпуса на полке теплицы. На рисунке 1 представлено кажущееся распределение температуры по поверхности корпуса источника питания модуля CM CoB Citizen CLU036-1208C1. Максимальная температура поверхности составила около 60-63°C при окружающей температуре 20°C и 80-85°C при температуре в теплице 30°C.

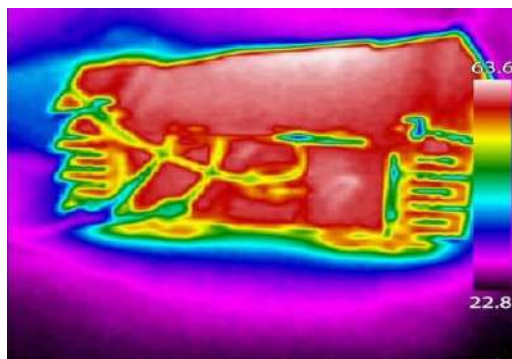


Рис. 1. Распределение температуры корпуса в стационарном режиме



Рис. 2. Источник питания со снятой крышкой

На рисунке 2 представлен вид источника питания со снятой крышкой. Сопоставляя рисунки 1 и 2 можно утверждать, что основным источником тепла является трансформатор, находящийся в средней части источника.

Время, мин	Ток, А	Напряжение, В	Температура измеренная тепловизором, °С	Температура измеренная термопарой, °С
40	1,4	71	100	75
150	1,4	71	110	80
240	1,4	71	115	82

Таб.1. Результаты измерений температуры трансформатора источника питания при температуре +30°С.

Как следует из таблицы, тепловизионные измерения дают несколько завышенное значение температуры, что должно учитываться при массовом контроле температуры.

В работе показано, что тепловизионный контроль может быть эффективно использован для выявления отклонений в работе светодиодных модулей тепличного хозяйства и предотвратить возможность их возгораний. Данный метод очень эффективен для мониторинга практических любых техногенных объектов.

Литература

1. Короткова К.В., Романова М.А., Смирнов С.В. Температурная и временная стабильность колориметрических параметров полупроводниковых источников света // Доклады ТУСУР. - 2017. Т. 20. №1. с. 38-41
2. Гончарова Ю.С., Романова М.А., Смирнов С.В. Спектральный метод бесконтактного измерения температуры кристаллов полупроводниковых источников света // Доклады Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники. – 2015. – №.2(36). – с.38-40.
3. Романова М.А., Трефилов П.М., Ицук И.Н., Шевченко А.В., Исхаков А.Ю., Мамченко М.В., Долгов А.А. Simulation of Thermal Fields in an Anisotropic Alternating Saturated Porous Medium for Environmental Monitoring Tasks Using UAV / Proceedings of the 12th International Conference "Management of Large-Scale System Development" (MLSD). M.: IEEE, 2019. с. 1-3 <https://ieeexplore.ieee.org/document/8911103>

УДК 535.14

Терагерцовая мягкая мода в замещенном гексаферрите бария $Ba_{1-x}Pb_xFe_{12}O_{19}$

М.Ю. Лукьянов¹, А.Г.М. Ахмед^{1,2}, А.А. Буш³, А.С. Прохоров^{1,4}, В.Б. Анзин^{1,4}, В.А. Абалмасов⁵,
Б.П. Гориунов¹, Л.Н. Алябьева¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Department of Physics, Faculty of Science, Sohag University

³Институт материалов твердотельной электроники РТУ МИРЭА

⁴Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

⁵Институт автоматики и электрометрии СО РАН

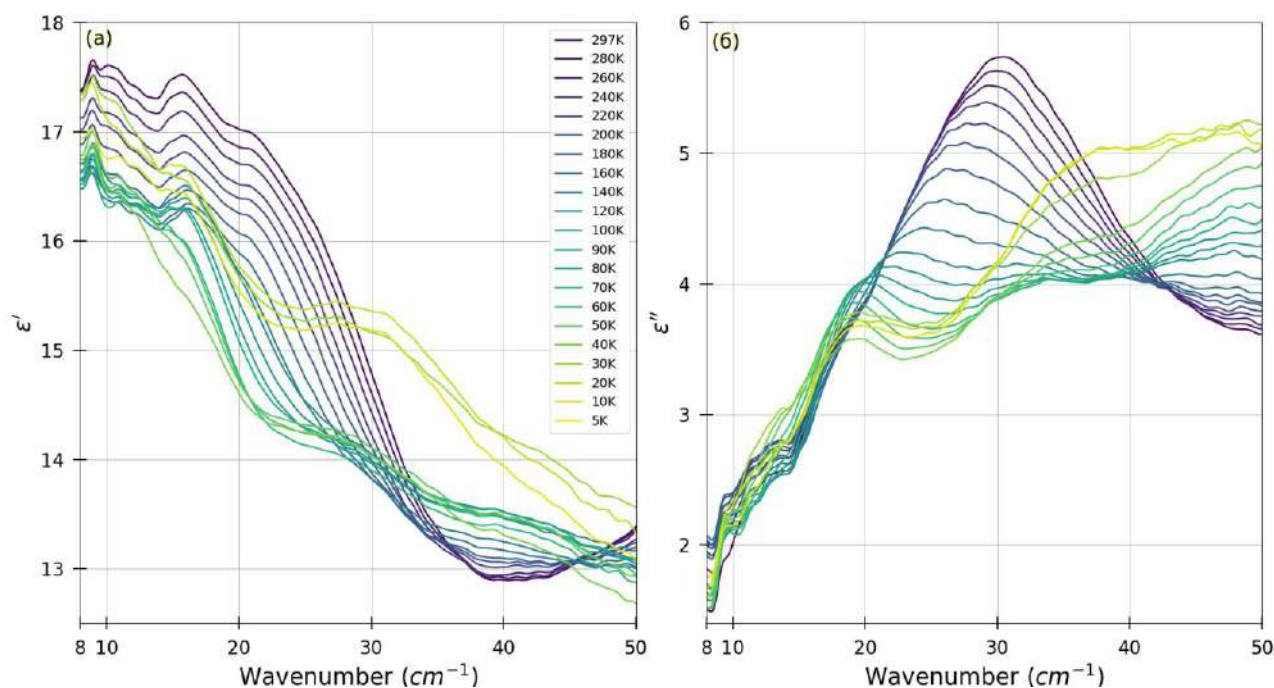
Гексаферриты бария, $BaFe_{12}O_{19}$, представляют собой оптически непрозрачные материалы со слоистой структурой (пространственная группа симметрии $R\bar{6}_3/mmc$). Катионы Fe^{3+} занимают пять различных позиций в кристаллической решетке: три в октаэдрах (2a, 4f₁, 12k), одну в тетраэдре (4f₂) и одну в пятикоординатной бипирамиде (2b). Катионы Ba^{2+} расположены в кислородном двенадцативершиннике (2d) [1]. Обладая уникальными электромагнитными характеристиками и будучи дешевыми в производстве, гексаферриты находят широкое применение в инженерии и приборостроении; на их основе производятся постоянные магниты, запоминающие устройства, высокочувствительные сенсоры магнитных полей и др. Высокая чувствительность функциональных характеристик (диэлектрическая проницаемость, поляризуемость, коэрцитивная сила и др.) к замещениям стимулирует исследования свойств замещенных составов, в частности, достаточно слабо изученного на сегодня терагерцового диэлектрического отклика гексаферритов. В данной работе выполнены первые исследования терагерцового диэлектрического отклика гексаферрита бария с замещением свинцом в области частот 0.06-2 ТГц при температурах 5-300 К. В результате обнаружена линия поглощения, частота которой уменьшается с понижением температуры (мягкая мода). Данный эффект может быть использован для создания перестраиваемых приборов терагерцового диапазона (фильтры, фазовращатели и др.).

Методами терагерцовой спектроскопии были исследованы керамики бариевых гексаферритов с замещением бария ионами свинца, $Ba_{1-x}Pb_xFe_{12}O_{19}$ (x=0.0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25, 0.30).

Спектры комплексного пропускания (амплитуда и фаза) керамических образцов толщиной ~ 200 мкм были измерены в диапазоне частот 2 - 65 см^{-1} при использовании терагерцового спектрометра на лампах обратной волны и двух коммерческих спектрометров временного разрешения “TeraView TPS Spectra 3000” и “Menlo Tera K15” при температурах 5-300 К.

В спектрах обнаружены два типа линий поглощения, которые были промоделированы с применением модели независимых Лорентцианов для определения температурных зависимостей параметров линий – резонансных частот, диэлектрических вкладов, сил осцилляторов и констант затухания. Во-первых, в спектрах наблюдается набор резонансных возбуждений, природа которых нами связывается с электронными переходами в тонкой структуре энергетических состояний ионов Fe^{2+} [2]. Во-вторых, нами обнаружено возбуждение (мягкая мода), частота которого уменьшается с уменьшением температуры от $\sim 30 \text{ см}^{-1}$ при $T = 300 \text{ К}$ до $\sim 18 \text{ см}^{-1}$ при $T = 5 \text{ К}$. Установлено, что температурное поведение частоты возбуждения не может быть описано уравнением Кохрана $\omega_0^2 \sim (T - T_c)$ [3] для мягкой сегнетоэлектрической моды, а следует степенной зависимости $\omega_0^4 \sim (T - T_c)$. Кроме этого, обнаружено значительное падение силы осциллятора моды при охлаждении.

Рис.1. Спектры действительной (а) и мнимой (б) частей комплексной диэлектрической проницае-



мости керамики гексаферрита бария, замещенного свинцом, $\text{Ba}_{0.70}\text{Pb}_{0.30}\text{Fe}_{12}\text{O}_{19}$, при температурах 5-300 К

В данном сообщении будут обсуждены механизмы, которые могут быть ответственными за «нестандартное» температурное поведение параметров обнаруженной мягкой моды, а также возможная близость магнито-электрической подсистемы исследованных соединений к квантовому фазовому переходу.

Терагерцовые измерения были выполнены при поддержке фонда РНФ грант 19-72-00055. Измерения в субтерагерцовом диапазоне выполнены при поддержке фонда РФФИ 20-32-90034.

Литература

1. Mikheykin A.S. *et al.* Lattice anharmonicity and polar soft mode in ferromagnetic M-type hexaferrite $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ single crystal. // The European Physical Journal. 2014. V. 87 P. 232-241.
2. Alyabyeva L.A. *et al* Influence of chemical substitution on broadband dielectric response of barium-lead M-type hexaferrite. // New J. Phys. 2019 V. 21. P. 063016 .
3. W. Cochran. Crystal stability and the theory of ferroelectricity // Adv. Phys. 1960 V. 9, P. 387.

Терагерцовая спектроскопия энергетических состояний одиночных молекул воды, локализованных внутри фуллеренов C₆₀

А.В. Мелентьев¹, П.А. Абрамов¹, М. Sajadi², С.С. Жуков¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Fritz-Haber-Institut der MPG, Berlin, Germany; Department of Chemistry, University of Paderborn, Paderborn

В данной работе методами ТГц спектроскопии было проведено исследование спектров молекул воды, локализованных внутри фуллерена C₆₀. В работах [1-5] эта система была изучена методами нейтронного рассеяния, ЯМР и инфракрасной спектроскопии. На рисунке 1 [5] приведен спектр вращательных энергетических уровней отдельной молекулы воды. Уширенными линиями показан результат снятия вырождения за счет взаимодействия молекулы с фуллереном.

Одиночная молекула воды помещалась внутрь фуллерена C₆₀ с помощью серии химических реакций, описанных в [6]. Полученный порошок H₂O@C₆₀ спрессовывался в таблетку диаметром 5 мм и толщиной 248 мкм. Для измерений использовались образцы с долей заполненных водой фуллеренов 5%. С помощью импульсного терагерцового спектрометра TeraView TPS Spectra 3000 были измерены спектры пропускания образцов при температурах от комнатной до гелиевой в диапазоне частот 10 – 100 см⁻¹. Также для наблюдения процесса орто-пара-конверсии на низких температурах была измерена временная зависимость спектров пропускания при фиксированной температуре 6 К. Для установления определенного начального соотношения орто- и пара изомеров перед измерением временных зависимостей состав выдерживался ($t \sim 3$ ч) при температуре 20 К. После этого образец быстро ($t \sim 5$ мин) охлаждался до 6 К, так что концентрация орто-воды практически не успевала измениться. Полученные данные были проанализированы с помощью модели Лоренца.

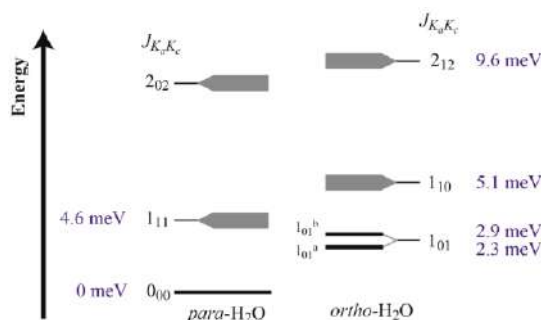


Рис.1. Схема энергетических уровней молекулы H₂O, заключенной внутри фуллерена C₆₀. [5]

На рисунке 2 изображены спектры пропускания, измеренные при различных температурах. Помимо линий поглощения, отвечающих переходам 0₀₀ – 1₁₁ (33 см⁻¹), 1₀₁ – 1₁₀ (17 см⁻¹) и 1₀₁ – 2₁₂ (51 см⁻¹), уже известным из [5], были обнаружены линии на частотах 63 см⁻¹ и 75 см⁻¹. Эти линии отсутствуют при температурах ниже 20 К или выше 150 К и имеют максимум интенсивности при T ≈ 40 К.

На рисунке 3 приведены спектры пропускания таблетки H₂O@C₆₀ при температуре T = 6 К сразу после охлаждения, через 200 минут и через 600 минут. Отчетливо видно изменение интенсивности линий поглощения, связанных с орто-пара конверсией молекул воды. Нам удалось разрешить тонкую структуру линий поглощения. Различимы линии, отвечающие переходам 1₀₁^a – 1₁₀ (17 см⁻¹) и 1₀₁^b – 1₁₀ (13 см⁻¹); также видно, что линия 0₀₀ – 1₁₁ состоит из трёх близко расположенных компонент, что свидетельствует о снятии вырождения уровня 1₁₁. Линия, отвечающая переходу 1₀₁ – 2₁₂, содержит четыре близких компонента.

Обнаруженные в спектрах резонансы моделировались Лоренцианами. Нами построены температурные и временные зависимости параметров Лоренцианов. На рисунке 4 в относительных единицах изображены временные зависимости концентраций поглощающих центров, связанных с переходами 0₀₀ – 1₁₁, 1₀₁ – 1₁₀ и 1₀₁ – 2₁₂, а также зависимость суммарной концентрации. Отсутствие временной зависимости суммарной концентрации говорит о том, что все наиболее интенсивные линии поглощения, связанные с орто- и пара-состояниями, были учтены. В предположении экспоненциальной зависимости концентраций от времени определены времена релаксации для всех переходов: $\tau(1_{01} - 1_{10}) = 420 \pm 50$ мин, $\tau(1_{01} - 2_{12}) = 600 \pm 100$ мин, $\tau(0_{00} - 1_{11}) = 500 \pm 10$ мин.

Авторы благодарны Vasileios Balos, Gabriela Hoffman, Shamim Alom, Михаилу Белянчикову, Mehmet Nebioglu, Seulki Roh, Artem Pronin, George R. Bacanu, Martin Wolf, Martin Dressel, Malcolm H. Levitt, Richard J. Whitby, Борису Горшунову за предоставленные образцы и детальные обсуждения результатов.

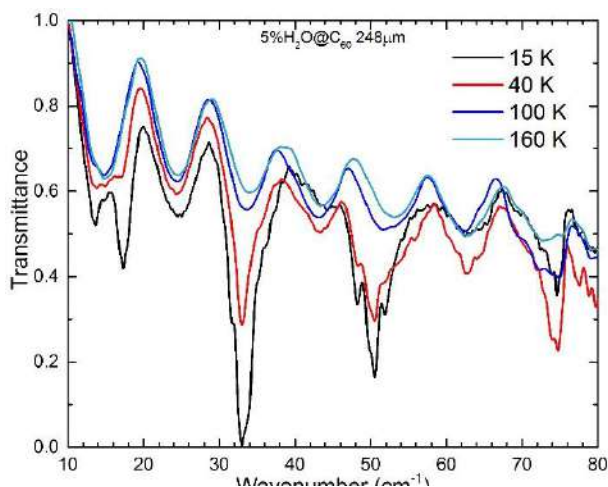


Рис.2. Спектры пропускания $\text{H}_2\text{O}@\text{C}_{60}$ при различных температурах

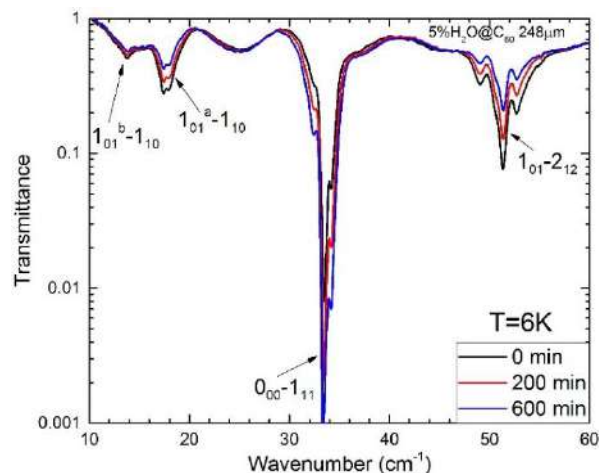


Рис.3. Спектры пропускания $\text{H}_2\text{O}@\text{C}_{60}$ при температуре 6 К сразу после охлаждения, спустя 200 минут и спустя

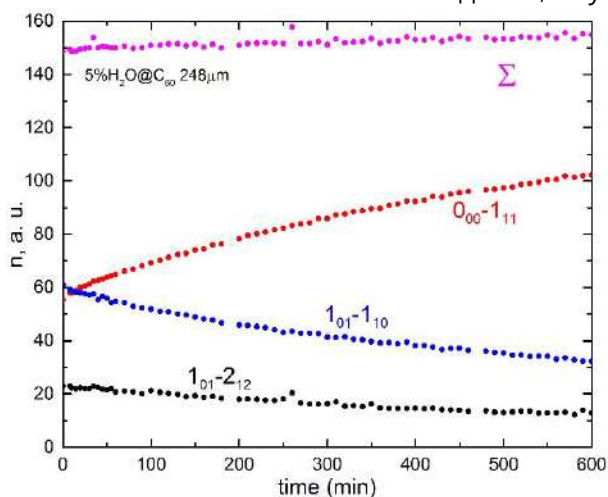


Рис.4. Временные зависимости концентрации поглощающих центров, связанных с переходами $0_{00} - 1_{11}$, $1_{01} - 1_{10}$ и $1_{01} - 2_{12}$, а также суммарной концентрации (Σ).

Литература

1. Mamone S. *et al.* Nuclear spin conversion of water inside fullerene cages detected by low-temperature nuclear magnetic resonance // J. Chem. Phys. 140, 194306 (2014).
2. Mamone S. *et al.* Rotor in a cage: Infrared spectroscopy of an endohedral hydrogen-fullerene complex // J. Chem. Phys. 130, 081103 (2009).
3. Meier B. *et al.* Electrical detection of ortho-para conversion in fullerene-encapsulated water // Nat. Commun. 6, 8112 (2015).
4. Goh K. S. K. *et al.* Symmetry-breaking in the endofullerene $\text{H}_2\text{O}@\text{C}_{60}$ revealed in the quantum dynamics of ortho and para-water: A neutron scattering investigation // Phys. Chem. Chem. Phys. 16, 21330–21339 (2014).
5. Hal Suzuki, Motohiro Nakano, Yoshifumi Hashikawa, and Yasujiro Murata. Rotational Motion and Nuclear Spin Interconversion of H_2O Encapsulated in C_{60} Appearing in the Low-Temperature Heat Capacity // The Journal of Physical Chemistry Letters 2019 10 (6), 1306-1311
6. Krachmalnicoff, A., Levitt, M. H., Whitby, R. J. An optimized scalable synthesis of $\text{H}_2\text{O}@\text{C}_{60}$ and a new synthesis of $\text{H}_2@\text{C}_{60}$ // Chem. Commun. 50, 13037–13040 (2014).

Управление спектром когерентного излучения среднего ИК диапазона при изменении внешней фокусировки

К.В. Львов^{1,2}, С.Ю. Стремоухов^{1,2}, Ф.В. Потемкин^{1,3}

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

³Международный учебно-научный лазерный центр МГУ им. М.В. Ломоносова

Генерация гармоник и суперконтинуума - хорошо известные и широко изучаемые нелинейные явления как в газах, так и в конденсированных средах. Задача увеличения эффективности генерации когерентного излучения является одной из фундаментальных проблем нелинейной оптики. Одним из наиболее естественных способов управления эффективностью генерации когерентного излучения является изменение фокусировки лазерного излучения. Условия внешней фокусировки позволяют изменять как интенсивность излучения в фокальной области, так и ее протяженность (длину взаимодействия) – два основных фактора, влияющих на эффективность генерации когерентного излучения. Вместе с тем, в виду сложного режима распространения сфокусированного излучения в среде, заранее предсказать влияние фокусировки на эффективность генерации когерентного излучения невозможно.

Излучение гармоник в твердых телах - один из возможных способов создания компактных источников когерентного излучения в ультрафиолетовом диапазоне [1]. Излучение суперконтинуума используется в спектроскопии с временным разрешением [2] и в оптических параметрических устройствах затравки [3]. Жесткость фокусировки оказывают влияние на вклад нелинейности Керра в уширение спектра импульса [4]. Кроме того, изменение положения перетяжки относительно нелинейной среды изменяет характер эволюции спектра суперконтинуума при увеличении энергии [5]. Эти исследования проводились для излучения с длиной волны 800 нм. Вместе с тем, в среднем ИК диапазоне длин волн, как показано в [6], возможно существенно расширить спектр суперконтинуума.

В данной работе численно исследуется влияние жесткости фокусировки на эффективность генерации гармоник и суперконтинуума в среднем ИК диапазоне. В качестве среды для распространения был выбран фторид кальция (CaF_2), поскольку этот диэлектрик прозрачен вплоть до 8 мкм, и он обладает высоким нелинейным показателем преломления, что делает его перспективным для генерации когерентного излучения. В расчетах использовались лазерные импульсы длительностью 200 фс с длиной волны 4,4 мкм, с энергией вплоть до 300 мкДж.

Для расчета электрического поля использовалось однонаправленное уравнение распространения импульса (UPPE) [7], которое учитывает дифракцию, дисперсию среды, кубическую нелинейность, поглощение лазерного излучения и дефокусировку в электронной плазме, поглощение лазерного излучения при фотоионизации. Расчет динамики плотности электронной плазмы проводился с помощью односкоростного уравнения, включающего в себя фотоионизацию (многофотонный и туннельный режимы), лавинную ионизацию и рекомбинацию.

Чтобы изучить влияние фокусирующих условий на генерацию гармоник низкого порядка, рассчитывалось распространение лазерного импульса с относительно небольшой мощностью (0,003 от критической мощности, при которой происходит генерация суперконтинуума). При таком режиме распространения плазменные нелинейности оказывают незначительное влияние на распространение импульса. Продemonстрировано, что эффективность генерации гармоник пропорциональна 4-й степени фокусного расстояния. Это указывает на то, что эффективность этого нелинейного процесса определяется длиной взаимодействия для генерации гармоник - конфокальным параметром. Действительно, конфокальный параметр пропорционален квадрату фокусного расстояния ($b \sim f^2$, для фокусных расстояний, существенно меньших дифракционной длины), а спектральная яркость гармоники в первом приближении пропорциональна квадрату конфокального параметра $\sim b^2 \sim f^4$.

Когда мощность в импульсе превышает критическую (в расчетах использовалось значение 9 критических мощностей), плазменная нелинейность значительно сказывается на генерации гармоник низкого порядка и суперконтинуума. Показано, что эффективность генерации когерентного излучения в префокальной области, где еще нет суперконтинуума, практически не зависит от жесткости фокусировки, что связано с балансом между двумя факторами: ростом интенсивности и увеличением длины взаимодействия (первый больше для более жесткой, а второй – для более слабой

фокусировки). В фокальной плоскости, где наблюдается резкое увеличение плотности электронной плазмы и происходит генерация суперконтинуума, яркость коротковолновой части спектра существенно выше при более жесткой фокусировке (яркость отличается в 20 раз при отличии фокусного расстояния в 2 раза). Это свидетельствует об определяющей роли интенсивности излучения в увеличении эффективности генерации когерентного излучения.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований (проекты № 18-02-40014 и 19-29-12030). К.В. Львов - стипендиат Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

Литература

1. Garg M., Kim H.Y., Goulielmakis E. Ultimate waveform reproducibility of extreme-ultraviolet pulses by high-harmonic generation in quartz // *Nat. Photon.* 2018. V. 12. P. 291-296.
2. Shumakova V., Ališauskas S., Malevich P. [et al.] Filamentation of mid-IR pulses in ambient air in the vicinity of molecular resonances // *Opt. Lett.* 2018. V. 43. P. 2185-2188.
3. Potemkin F.V., Migal E.A., Pushkin A.V. [et al.] Mid-IR (4–5 μm) femtosecond multipass amplification of optical parametric seed pulse up to gigawatt level in $\text{Fe}^{2+}:\text{ZnSe}$ with optical pumping by a solid-state 3 μm laser // *Laser Phys. Lett.* 2016. V. 13. No. 12. P. 125403.
4. Naseri N., Dupras G., Ramunno L. Mechanism of laser induced filamentation in dielectrics // *Opt. Express.* 2020. V. 28. P. 26977-26988.
5. Jukna V., Garejev N., Tamosauskas G. [et al.] Role of external focusing geometry in supercontinuum generation in bulk solid-state media // *J. Opt. Soc. Am. B.* 2019. V. 36. P. 54-A60.
6. Garejev N., Jukna V., Tamosauskas G. [et al.] Odd harmonics-enhanced supercontinuum in bulk solid-state dielectric medium // *Opt. Express.* 2016. V. 24. P. 17060-17068.
7. Lvov K.V., Stremoukhov S. Yu., Potemkin F.V. [et al.] Asymmetric temporal splitting of laser pulse and broad supercontinuum generation under femtosecond filamentation in YAG crystal // *Laser Phys. Lett.* 2018. V. 15. P. 085402.

УДК 53

Устойчивые к воздействию воздушной среды тонкие медные пленки для плазмонных приложений, созданные методом УФ-озонирования

**В.Р. Соловей¹, Д.И. Якубовский¹, Д.Е. Татаркин, Г.А. Ермолаев¹, Ю.Ю. Лебединский²,
А.М. Маркеев², В.Н. Попок³, А.В. Арсенин¹, В.С. Волков¹, С.М. Новиков¹**

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² ЦКП МФТИ НИУ

³ Department of Materials and Production, Aalborg University Skjernvej 4A

Золото, серебро и медь обладают превосходными плазмонными свойствами в видимом и ближнем инфракрасном диапазоне, однако стабильность некоторых из них, часто является ограничивающим фактором при выборе материала для тех или иных приложений оптики, электроники, сенсорики и др. [1,2]. Наиболее распространенным материалом для плазмоники является золото, оно обладает отличными оптическими свойствами и устойчивостью к окислению, однако является дорогостоящим и часто несовместимым с микроэлектронными техпроцессами. Серебро также широко используется [3-5] и демонстрирует превосходные характеристики благодаря низким оптическим потерям, но считается менее привлекательным из-за более низкой химической и плазмонной стабильности [6]. Медь обладает прекрасными оптическими свойствами. По сравнению с золотом медь более доступна и имеет меньшие оптические потери в видимом и ближнем ИК диапазонах. Преимущества меди в плазмонных приложениях были продемонстрированы в медных плазмонных волноводах со сверхмалыми потерями и в приложениях для биосенсорики [7-9]. Медь склонна к быстрому окислению при воздействии окружающей среды [10] (при н.у. преобладает Cu_2O с незначительным вкладом CuO). Чтобы использовать медь для плазмонных приложений возможно защитить ее поверхность несколькими путями, нанеся защитное покрытие из SiO_2 , Al_2O_3 или даже графена [11]. В этой работе представлен новый простой и эффективный метод УФ-озонирования, приводящий к быстрому образованию тонкого оксидного слоя (CuO) на медной пленке, который эффективно защищает медь от последующей деградации [12].

Пленки меди толщиной 25 нм нанесены методом электронно-лучевого испарения. Чистые кремниевые пластины, покрытые слоем SiO_2 (толщиной 2 нм), помещались в вакуумную камеру испарителя NEE-4000 ($3 \cdot 10^{-7}$ Торр при н.у); использовались гранулы чистотой меди 99,99%. Скорость напыления: ~ 2 А/с. За один цикл было изготовлено 6 идентичных образцов. Готовые пленки были изучены с помощью сканирующего электронного микроскопа (SEM) JEOL JSM-7001F (рис. 1(б)). Сразу после нанесения 5 из 6 образцов были подвержены УФ-озонированию (Ossila Limited). УФ-излучение разрывает двойную связь O-O, что приводит к образованию двух свободных радикалов кислорода O. Эти радикалы могут реагировать с молекулярным кислородом, образуя озон O_3 . Смесь O и O_3 может привести к быстрому образованию оксидной пленки на поверхности меди (рис. 1а).

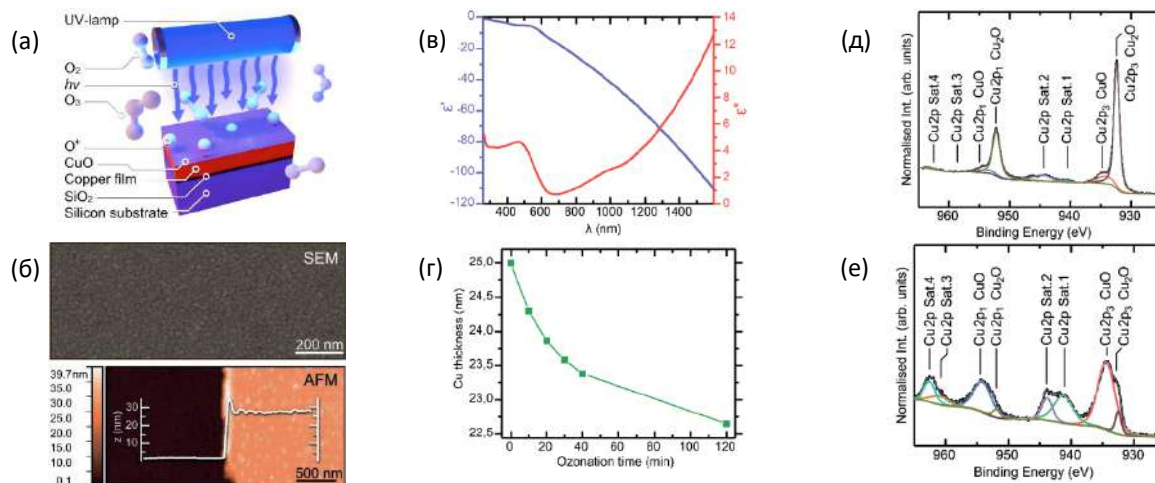


Рис. 1. (а) Схема УФ-озонирования медных пленок. (б) SEM и AFM микроскопия. (в, г) Эллипсометрия и результат анализа роста CuO ; (д, е) XPS анализ образцов до и после УФ-озонирования.

эталонного образца для измерения оптических свойств пленки Cu . Оптические свойства медных пленок (эталонные и УФ-озонированные) изучались с помощью эллипсометра V-VASE (Woollam Co.; спектральный диапазон: 280-1600 нм; углы падения луча: 65° , 70° и 75°). АСМ позволила определить толщину пленок: $25,0 \pm 0,5$ нм (Рис. 1(б)). При обработке данных эллипсометрии использовались данные АСМ и XPS, а также применялась многослойная модель анализа ($\text{Si} + \text{SiO}_2 + \text{Cu} + \text{CuO}$) [13]. Видно, что толщина меди уменьшается с увеличением времени озонирования, что может свидетельствовать об образовании оксидного слоя за счет металлической меди (см. рис. 1г). Химическое состояние и состав образцов анализировали методом XPS-анализа (рис. (д, е)) на ThetaProbe (ThermoScientific) в условиях высокого вакуума с источником монохроматического рентгеновского излучения $\text{Al K}\alpha$ (1486,6 эВ). XPS-анализ проводили через 4 часа после изготовления пленки, образцы хранили в окружающей атмосфере. Спектры XPS эталонного образца, представленные на рисунке 1(е), показывают характеристические полосы при 932,6 и 952,4 эВ [14,15]. Из узкой полосы пропускания $\text{Cu}2p_3$ можно предположить, что сигнал исходит от металла, с учетом образования Cu_2O в течение времени, пока образцы находились в воздухе. XPS-спектры пленки меди, озонированной в течение 40 мин, показывали значительное увеличение плеч $\text{Cu}2p_{3/2}$ и $\text{Cu}2p_{1/2}$ при 934,7 и 954,5 эВ соответственно. Последний может быть отнесен к CuO , а первый - к $\text{Cu}(\text{OH})_2$ [15]. Также наблюдаются два новых сильных сателлита при 941 и 963 эВ, характерных для спектров CuO [15]. Полученные результаты показывают значительную разницу в окислении меди в условиях окружающей среды и при обработке УФ-озоном. В то время как для пленок, окисленных в окружающей атмосфере, преобладает Cu_2O с незначительным вкладом CuO или без него [16], для медной пленки, обработанной УФ-озоном, окисление происходит преимущественно за счет образования CuO . На основании измерений эллипсометрии и XPS (глубина анализа XPS низкая, < 3 нм) можно оценить толщину образовавшегося оксида как 3-4 нм.

Поскольку слой CuO эффективно защищает медь от окисления, УФ-озонирование является более простым и дешевым решением для сохранения функциональных свойств меди в приложениях нанoeлектроники, нанооптики, и биосенсорике.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №20-07-00475 и №18-37-20061), а также технической поддержке ЦКП МФТИ.

Литература

1. S. Maier Plasmonics: Fundamentals and Applications. Springer (New York, 2007).
2. J. Langer, S.M. Novikov, L.M. Liz-Marzan, Nanotechnology 26, 322001 (2015).
3. N. A. Brazhe, A. B. Evlyukhin, E. A. Goodilin, A. A. Semenova, S. M. Novikov, S. I. Bozhevolnyi, B. N. Chichkov, A. S. Sarycheva, A. A. Baizhumanov, E. I. Nikelshparg, et al. Sci. Rep. 5, 13793 (2015).
4. K. M. McPeak, S. V. Jayanti, S. J. P. Kress, S. Meyer, S. Iotti, A. Rossinelli, D. J. Norris, ACS Photonics 2, 326-333 (2015).
5. X. Zhang, E. M. Hicks, J. Zhao, G. C. Schatz, R. P. Van Duyne, Nano Lett. 5, 1503 (2005).
6. S.M. Novikov, V.N. Popok, A.B. Evlyukhin, M. Hanif, P. Morgen, J. Fiutowski, J. Beermann, H.-G. Rubahn, S.I. Bozhevolnyi, Langmuir 33, 6062 (2017).
7. D. I. Yakubovsky, D. Y. Fedyanin, A. V. Arsenin, V. S. Volkov, AIP Conf. Proc. 2017, 1874, 040-057 (2017).
8. Y. V. Stebunov, D. I. Yakubovsky, D. Yu. Fedyanin, A. V. Arsenin, V. S. Volkov, Langmuir 34, 4681-4687, (2018).
9. D. I. Yakubovsky, Y. V. Stebunov, R.V. Kirtaev, K.V. Voronin, A.A. Voronov, A.V. Arsenin, V.S. Volkov, Nanomaterials 8, 1058, (2018).
10. J. H. Par, P. Ambwani, M. Manno, N. C. Lindquist, P. Nagpal, S.-H. Oh, C. Leighton, D. J. Norris, Adv. Mater., 24, 3988-3992 (2012).
11. V. G. Kravets, R. Jalil, Y.-J. Kim, D. Ansell, D. E.; Aznakayeva, B. Thackray, L. Britnell, B. D. Belle, F. Withers, I. P. Radko, Z. Han, S. I. Bozhevolnyi, K. S. Novoselov, A. K. Geim, A. N. Grigorenko Sci. Rep. 4, 5517 (2014).
12. V.N. Popok, S.M. Novikov, Y.Y. Lebedinskij, A.M. Markeev, A.A. Andreev, I. N. Trunkin, A. V. Arsenin, V. S. Volkov Plasmonics, 1-8 (2020).
13. D. I. Yakubovsky, A. V. Arsenin, Y. V. Stebunov, D.Y. Fedyanin, V. S. Volkov, Express 25, 25574-25587 (2017).
14. S. Poulston, P. M. Parlett, P. Stone, M. Bowker, Surf. Interface Anal. 24, 811 (1996).
15. C. Biesinger, L.W.M. Lau, A. R. Gerson, R. St.C. Smart, Appl. Surf. Sci., 257, 887 (2010).
16. J. H. Kim, S. H. Ehrman, T. A. Germer, Appl. Phys. Lett. 84, 1278 (2004).

УДК 535.016

Экспериментальная демонстрация эффекта “плазмонного крюка” в диэлектрической ассиметричной частице

***Д.И. Якубовский¹, Д.С. Пономарев^{2,1}, И.А. Глинский², И.В. Минин³, О.В. Минин³,
А.В. Арсенин¹, В.С. Волков¹***

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

² Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники
имени В.Г. Мокерова Российской академии наук

³ Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Исследование изогнутых, ускоряющихся и самогибующихся Эйри-подобных оптических пучков открыло новые возможности для плазмоники, визуализации с высоким оптическим разрешением и биофотоники [1]. Ранее, на основе пучков распространяющихся в свободном пространстве, была теоретически предсказана новая изогнутая волна поверхностного плазмон-поляритона ППП - “плазмонный крюк”, которая может быть реализована в результате прохождения ППП через ассиметричную диэлектрическую микроструктуру [2]. Изогнутая форма ППП возникает из-за конструктивной интерференции между падающим, рассеянным и дифрагированным полями вблизи диэлектрической частицы из-за взаимодействий в ближнем поле на теневой границе структуры. Было показано, что подобная волна распространяется по искривленной траектории с перегибом, где ППП меняет свое направление распространения, со значительно меньшей областью поворота (вблизи длины волны ППП), по сравнению с пучками семейства Эйри [2].

Недавно фотонный крючок был экспериментально продемонстрирован в свободном пространстве в суб-терагерцовом диапазоне частот [3]. В настоящей работе показана первая экспериментальная проверка эффекта “плазмонного крюка”, полученного на ассиметричной диэлектрической микроструктуре, изображенной на Рисунке 1(а), в диапазоне длин волн 1510–1590 нм с помощью измерения распределения интенсивности электромагнитного (ЭМ) поля с использованием метода сканирующей ближнепольной оптической микроскопии (СБОМ) в сочетании с подтверждением полученных измерений путем теоретического моделирования (см. Рисунок 1(б)).

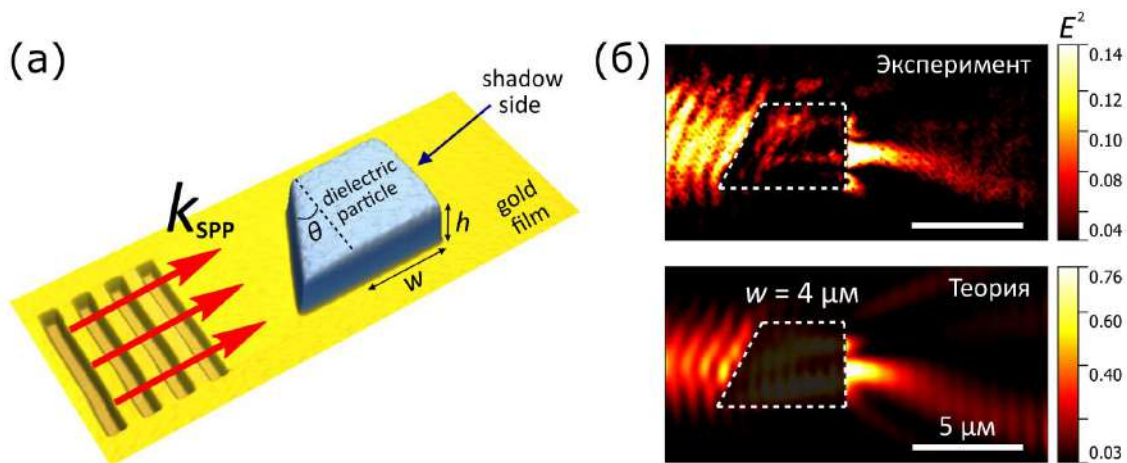


Рис. 1. (а) 3D изображение структуры, включающей плазмонную решетку и диэлектрическую трапециевидную частицу с обозначением ее геометрических параметров. (б) Сравнение распределения интенсивности ЭМ поля, измеренного СБОМ и рассчитанного с помощью COMSOL для частицы шириной $w = 4$ мкм на длине волны излучения 1590 нм.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 18-29-02089, 18-37-20061, 20-07-00840 и РНФ 18-79-10195

Литература

1. Minin I.V., Minin O.V., Glinskiy I.A., Khabibullin R.A., Malureanu R., Lavrinenko A.V., Yakubovsky D.I., Arsenin A.V., Volkov V.S., Ponomarev D.S., Plasmonic nanojet: an experimental demonstration // Optics Letters – 2020. – V. 45. – P. 3244–3247.
2. Minin I.V., Minin O.V., Ponomarev D.S., Glinskiy I.A., Photonic hook plasmons: a new curved surface wave // Ann. Physik. – 2018. – V. 530. – N. 1800359.
3. Minin I. V., Minin O. V., Katyba G. M., Chernomyrdin N. V., Kurlov V. N., Zaytsev K. I., Yue L., Wang Z., Christodoulides D. N., Experimental observation of a photonic hook // Appl. Phys. Lett. – 2019. – V. 114. – N. 031105.

УДК 621.315.592:621.383

Эпитаксиальные гетероструктуры InGaAs/InGaAsP/InP для мощных фотоприемников ближнего ИК-диапазона

Н.Н. Брагин, М.А. Ладугин, Ю.Л. Рябоштан, А.А. Мармалюк, А.В. Иванов

АО «НИИ «Полюс» им. М.Ф. Стельмаха»

На сегодняшний день в квантово-оптических системах передачи информации крайне востребованы полупроводниковые фотоприёмники, чувствительные в спектральном диапазоне 0.9-1.7 мкм. Это объясняется наличием окон прозрачности в широко используемом кварцевом оптическом волокне. При этом особый практический интерес представляет работа на длине волны 1.55 мкм, обеспечивающей минимальное поглощение излучения в волокне. В данных условиях наиболее подходящим светочувствительным материалом, спектр поглощения которого охватывает вышеуказанный диапазон, является InGaAs, согласованный с подложкой InP.

Относительно простые с точки зрения конструкции и технологии P-i-N фотодиоды на основе InGaAs обеспечивают прием сигнала с частотами порядка 10-20 ГГц [1], однако испытывают насыщение фототока уже при уровнях входной оптической мощности около 10 дБм. Это обусловлено тем, что в традиционных конструкциях P-i-N гетероструктур фото-генерированные электроны и дырки в обедненном поглощающем слое экранируются внутренним электрическим полем, что так же называется эффектом области пространственного заряда (ОПЗ). Данное явление вызывает ухудшение высокоскоростного отклика фотоприемника при высоком уровне фототока и одновременно снижает чувствительность. Для улучшения скоростных характеристик при высокой мощности была предложена конструкция UTC (Uni-Traveling-Carrier) фотодиода (рис. 1), которая позволяет использовать исключительно быстрые электроны ($\mu = 12 \cdot 10^3 \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$) в качестве носителей заряда, исключая

вклад в фототок медленных дырок ($\mu = 300 \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$) [2], что позволяет повысить ток насыщения, уменьшая эффект ОПЗ, и одновременно обеспечить высокое быстродействие прибора. Однако создание подобных гетероструктур сопряжено с рядом конструктивных и технологических проблем, связанных с выбором состава, толщины и легирования материалов, а также получением кристаллически совершенных эпитаксиальных слоев InP, InGaAs и InGaAsP. Например, для преодоления эффекта пространственного заряда и достижения высокой скорости отклика в структуре UTC-фотодиода поглощающий активный слой подвергают специальному профильному легированию для создания квази-поля, облегчающего дрейф электронов [3].

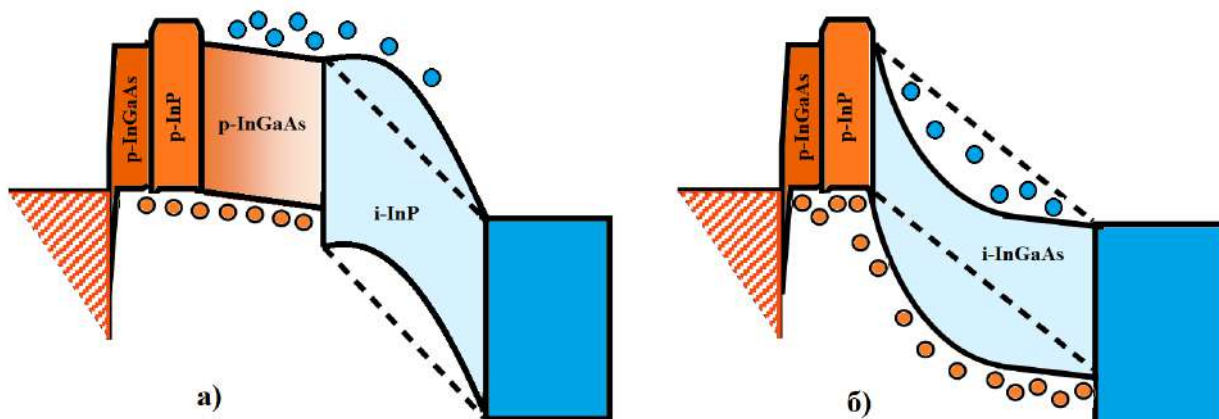


Рис. 1. Зонная диаграмма фотоприемных гетероструктур при приложенном смещении: а) UTC; б) P-i-N.

В работе проведён анализ спектра поглощения слоев, входящих в гетероструктуру, и рассчитаны зависимости спектральной чувствительности UTC-фотодиода от толщины, состава и легирования слоев.

Исследованы особенности получения указанных гетероструктур методом МОС-гидридной эпитаксии. Экспериментально установлено, что цинк, используемый в качестве примеси р-типа проводимости, способен перераспределяться на гетерограницах различных слоев, что нарушает заданный профиль и приводит к ухудшению параметров фотодиода, а именно смещает максимум фото-чувствительности UTC-PD в коротковолновую область спектра.

В рамках данной работы предложено введение в конструкцию гетероструктуры барьерного слоя InGaAsP ($E_g = 1.1$ эВ) вместо InP (рис. 2). Это позволило обеспечить заданный профиль распределения примеси и реализовать на такой гетероструктуре высокоэффективные UTC-фотодиоды. Разработанные фотоприёмники с чувствительностью в диапазоне 0.9-1.7 мкм позволили повысить фототок насыщения в несколько раз по сравнению с аналогичными значениями для типичных P-i-N фотоприёмников.

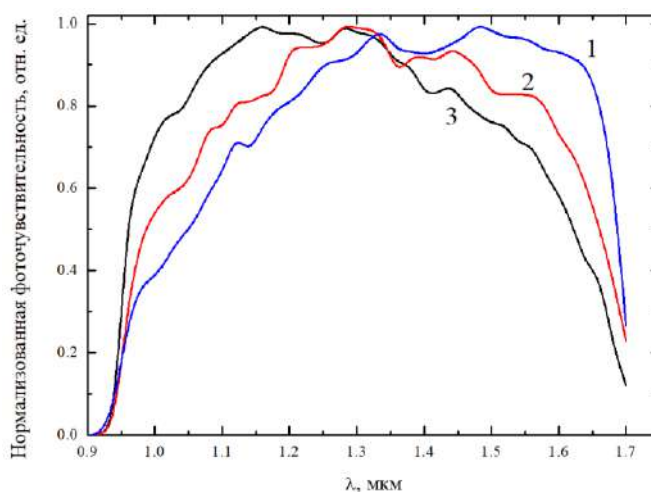


Рис. 2. Спектральная характеристика фотодиодов, изготовленных на основе различных конструкций гетероструктур: 1 – PIN, 2 – UTC с барьером InGaAsP, 3 – UTC с барьером InP.

Литература

1. *Caramona Fernandes C.M., Torres Pereira J.M.* Bandwidth Modeling and Optimization of PIN Photodiodes // International Conference on Computer as a Tool. 2011. №27. P. 626-632.
2. *Levinshtein M., Rumyantsev S., Shur M.* Handbook Series on Semiconductor Parameters. - Singapore: New Jersey: World Scientific, 1999.
3. *Ishibashi T., Kodama S., Shimizu N., Furuta T.* High-Speed Response of Uni-Travelling-Carrier Photodiodes // Japanese Journal of Applied Physics. 1997. №10. P. 6263-6268.

Секция фундаментальных основ многомасштабного атомистического моделирования

Председатель: Г.Э. Норман (д.ф.-м.н., профессор)
Зам. председателя: Н.М. Щелкачёв (д.ф.-м.н., доцент)
Секретарь: И.Д. Федоров

Дата: 28.11.2020 Время: 10:00

УДК 533.9.01

Влияние кильватерного потенциала на динамику пылевых частиц в комплексной плазме

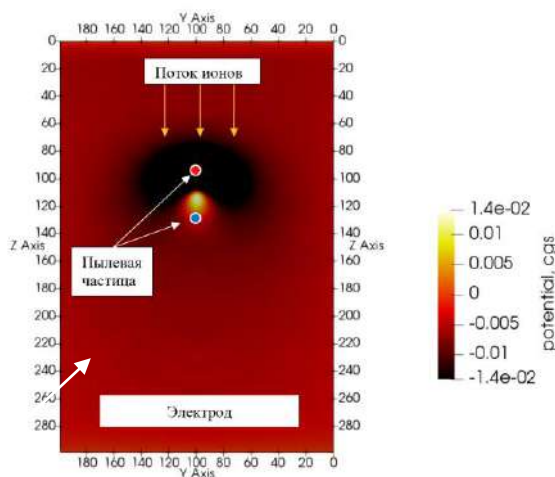
Д.А. Колотинский^{1,2}, А.В. Тимофеев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Пылевая плазма – слабо ионизированный газ, содержащий частицы конденсированного вещества микронных и субмикронных размеров[1]. Эти частицы обычно имеют отрицательный заряд в силу разности подвижностей ионов и электронов в плазме. В отсутствии внешних электрических полей ионы и электроны распределяются в пространстве радиально симметрично и экранируют электрический потенциал пылевой частицы. Этот потенциал также обладает радиальной симметрией и в линейном приближении может быть описан выражением Дебая-Хюккеля. Однако наибольшее число экспериментов с пылевой плазмой проводятся в условиях земной гравитации, и для того чтобы пылевая частица могла левитировать, система помещается во внешнее электрическое поле. Примером такой системы может являться разряд постоянного или переменного тока, внутри которого находятся пылевые частицы. Присутствие электрического поля приводит к отклонению распределения ионов в пространстве от радиально симметричного случая, и потенциал вокруг пылевой частицы также теряет радиальную симметрию. Анизотропия потенциала вокруг пылевой частицы может иметь существенное влияние на структурные и динамические свойства системы пылевых частиц.

В данной работе произведено теоретическое исследование влияния кильватерного потенциала на динамику двух пылевых частиц, находящихся в плазме газового разряда. Показано, что при расположении частиц параллельно ионному потоку происходит раскачка колебаний нижней по потоку частицы. Исследовано влияние параметров плазменно-пылевой системы на динамику двух пылевых частиц.

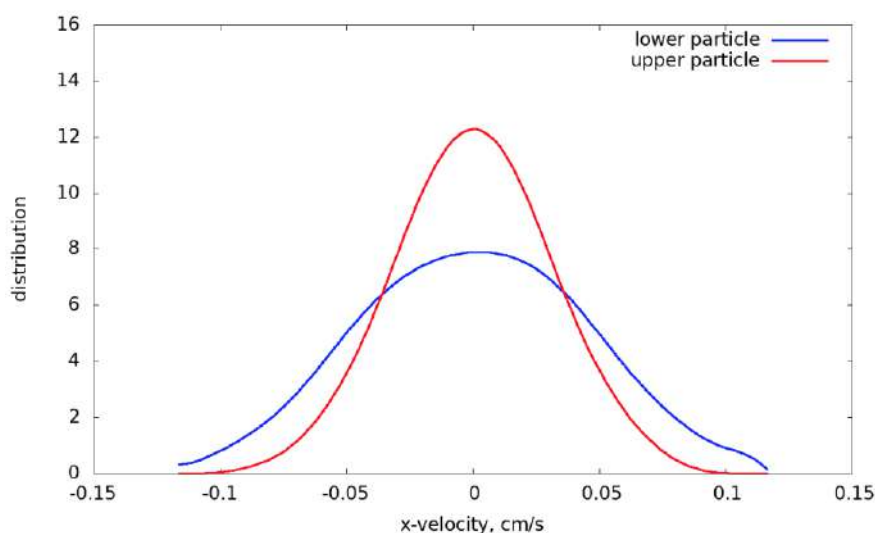


Для расчета кильватерного потенциала вокруг пылевой частицы в данной работе использован метод PIC, реализованной в библиотеке СОРТИС [2]. При этом необходимо отметить, что в моделировании ионы не находятся в тепловом равновесии и, соответственно, имеют немаквелловское распределение. В отличие от случая маквелловских ионов, расчет для которых дает кильватерный потенциал, в хвосте которого присутствует несколько локальных максимумов и минимумов, в данном случае наблюдается только один максимум потенциала [3]. В данной работе рассматриваются параметры плазменно-пылевой системы, соответствующие экспериментальной работе [4].

Конфигурация системы показана на рисунке выше. Две частицы находятся в плазме газового разряда в приэлектродной области, выровненные одна над другой посредством параболической ловушки. Сила тяжести компенсируется электростатической силой. Нижняя частица (синяя) действует на верхнюю (красная) потенциалом Дебая, а сила верхней частицы на нижнюю рассчитывается из кильватерного потенциала, распределение которого также проиллюстрировано на рисунке выше. Таким образом, взаимодействие между пылевыми частицами оказывается невзаимным.

Для расчета динамики пылевых частиц используется скоростная схема Верле. В ходе расчета на пылевые частицы воздействует термостат Ланжевена, который описывает взаимодействие пылевых частиц с плазменным окружением.

Сила между пылевыми частицами в плазме при наличии потока ионов оказывается невзаимной, что приводит к раскачке колебаний нижней частицы. На рисунке представлено распределение скоростей пылевых частиц по времени, полученное в результате численного моделирования, красная кривая соответствует верхней частицы, синяя кривая – нижней.



Из графика видно, что нижняя частица имеет большую среднюю кинетическую энергию чем верхняя.

Таким образом, результаты данной работы объясняют аномальный разогрев колебаний в системе двух пылевых частиц – дополнительная кинетическая энергия колебаний является следствием невзаимного взаимодействия пылевых частиц, вызванного наличием потока ионов в плазменно-пылевой системе.

Литература

1. Фортов В.Е, Храпак А.С., Храпак Г.А, Молотков В.И., Петров О.Ф. Пылевая плазма // Успехи физических наук. 2004. Т 174, No8. С 495-513.
2. Hutchinson I. H. Nonlinear collisionless plasma wakes of small particles //Physics of Plasmas. – 2011. – Т. 18. – №. 3. – С. 032111
3. Sundar S. et al. Collision induced amplification of wakes in streaming plasmas //arXiv preprint arXiv:1702.07152. – 2017.
4. Mukhopadhyay A. K., Goree J. Experimental measurement of velocity correlations for two microparticles in a plasma with ion flow //Physical Review E. – 2014. – Т. 90. – №. 1. – С. 013102.]

Воспроизведение поликристаллической структуры железа с помощью метода молекулярной динамики

Д.Г. Павлов^{1,2}, В.В. Стегайлов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Межзеренные границы в поликристаллических материалах вносят определенный вклад в их свойства. Этот вклад весьма существенен для таких материалов, как наноструктуры или мелкозернистые стали. Одним из свойств, подверженных сильному влиянию со стороны природы межзеренных границ, является диффузия, так как движение частиц на границах зерен является более интенсивным по сравнению с их внутренностью.

Для молекулярно-динамического исследования свойств поликристаллической структуры твердых тел, эту структуру необходимо воспроизвести. При исследовании свойств межзеренных границ, эти границы зачастую создаются путем совмещения двух кристаллических решеток и релаксации или отжига границы. Проблема такого метода заключается в том, что такая модель может недостаточно точно описывать реальную межзеренную границу. В данной работе производится попытка получить межзеренную границу путем контролируемой кристаллизации расплавленного вещества.

В данной работе с помощью методов молекулярной динамики рассматривается кристаллизация переохлажденного железа, наподобие уже существующих работ [1]. Для ускорения процесса снятия измерений и контроля ориентации кристаллической структуры в переохлажденный расплав помещаются затравки, представляющие из себя сегменты кристаллической решетки. Уравнения молекулярной динамики для системы частиц были заданы эмпирическим потенциалом EAM FS [2]. Было использовано исходное строение кристаллической решетки железа из базы данных The Materials Project [3]. Для визуализации и конвертации данных было использовано свободное ПО OVITO [4]. Работа проведена при поддержке РФФИ (грант №20-21-00159).

Литература

1. Shibuta Y., Sakane S., Miyoshi E. et al. Heterogeneity in homogeneous nucleation from billion-atom molecular dynamics simulation of solidification of pure metal. // Nat Commun 8, 10 (2017)
2. Finnis M. W., Sinclair J. E. A simple empirical N-body potential for transition metals. // Philos. Mag. A 50, 45–55 (1984)
3. Jain A., Ong S.P., Hautier G., Chen W., Richards W.D., Dacek S., Cholia S., Gunter D., Skinner D., Ceder G., Persson K.A. The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation // APL Materials, 2013, 1(1), 011002.
4. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 18, 2010, 015012

Дефекты кубической фазы магнетита: результаты расчета в DFT+U

М.И. Шутикова^{1,2}, В.В. Стегайлов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Магнетит - магнитный оксид железа с химической формулой Fe_3O_4 . Широкое использование магнетита в современном мире и возможности его применения в новых перспективных приложениях обуславливают актуальность исследования свойств дефектной и бездефектной кубической фазы магнетита.

Свойства кубической фазы магнетита получены в рамках теории функционала плотности с поправкой, учитывающей сильные электронные корреляции (метод DFT+U). Проанализирована чувствительность результатов к параметрам расчета: величине поправки для описания сильных электронных корреляций, начальным приближениям к волновым функциям и плотности, размеру суперячейки. Из сравнения расчетных и экспериментальных [1,2] данных найден набор допущений

для наиболее адекватного описания кубической фазы магнетита в рамках DFT+U. С помощью этого набора вычислены оценки энергий образования изолированных точечных дефектов магнетита.

Работа выполняется при поддержке РФФИ (грант 20-21-00159).

Литература

1. Banerjee A., Pal A.J. Track the bands: Verwey phase transition in single magnetite nanocrystals // J. Phys. Condens. Matter. 2020. Vol. 32, № 5. P. 055701.
2. Park J.-H. et al. Single-particle gap above the Verwey transition in Fe₃O₄ // Phys. Rev. B. 1997. Vol. 55, № 19. P. 12813–12817.

УДК 538.931

Изучение роли поляризации в процессе ионной проводимости керамики диоксида циркония

Т. М. Савилов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Объединенный институт высоких температур Российской академии наук

Диоксид циркония широко применяется в электрохимических устройствах в качестве твёрдого электролита [1]. Основное его применение - высокотемпературный электролиз для получения водорода [2]. Для данного процесса критически важна высокая ионная проводимость материала и устойчивость к высоким температурам. Исследованию влияния поляризации на ионную проводимость при высоких температурах посвящена данная работа.

Было проведено моделирование кристаллической решётки диоксида циркония с помощью программного пакета LAMMPS. Использованы потенциалы Бакингема и Кулона:

$$U(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = k \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + A \exp(-B|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) - \frac{C}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^6},$$

где $U(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ – потенциальная энергия взаимодействия двух частиц, $\vec{r}_i, \vec{r}_j$ – радиус-векторы соответствующих частиц, q_i, q_j – заряды частиц, A, B, C – постоянные потенциала Бакингема, индивидуально подобранные для всех видов пар частиц [3]. Для воспроизведения поляризации каждый ион был представлен в виде массивной частицы (ядра) с зарядом $Y|e|$ и почти безмассовой частицы (оболочки) с зарядом $X|e|$ [4]. Суммарный заряд ядра и оболочки равен исходному заряду иона. Новые пары связаны пружинами с коэффициентами жёсткости k_i [3]. Энергия связи рассчитывалась по формуле:

$$U_{bond} = \sum_{i=1}^N k_i (\vec{R}_i - \vec{r}_i)^2,$$

где $\vec{R}_i, \vec{r}_i$ – координаты соответствующих ядра и оболочки. Электронного взаимодействия между частицами в паре нет. Для расчёта коэффициента диффузии была использована формула Эйнштейна-Смолуховского. Полученные данные аппроксимировались по формуле Аррениуса.

Полученные результаты представлены на рис. 1. Как видно, добавление в систему поляризации существенно изменяет свойства системы. Во-первых, система без поляризации существует в кристаллической фазе при температурах, превышающих температуру плавления диоксида циркония, что говорит об её явной несостоятельности. Во-вторых, полученные данные для высоких температур в системе с поляризацией разумно продолжают тренд реальных экспериментов [5,6]. Наблюдается некоторый сдвиг вниз, который может быть вызван монокристаллической структурой системы. Кроме того, присутствует возможный излом графика при $T = 1880 \text{ K}$, что может быть свидетельством фазового перехода. В дальнейшем планируется моделирование поликристаллической формы диоксида циркония, а также изучение возможного фазового перехода.

Автор выражает благодарность Ланкину А. В. и Норману Г. Э. за помощь при выполнении работы.

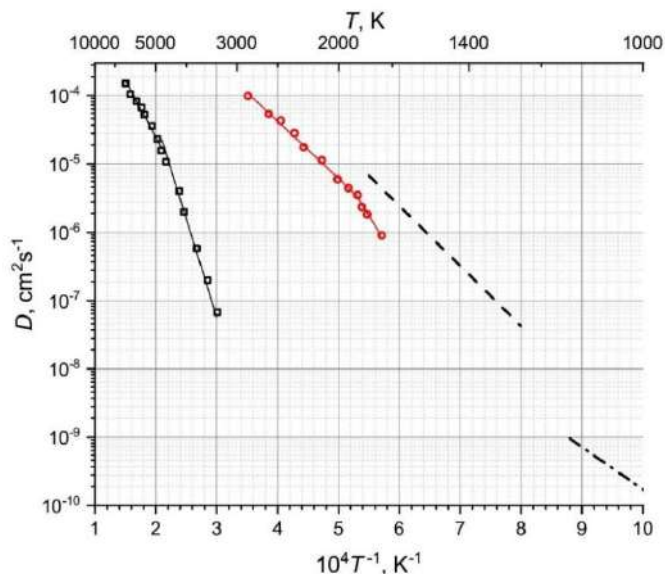


Рис 15. Зависимость коэффициента диффузии от температуры для системы с поляризацией (красные квадраты) и без неё (чёрные круги), а также экспериментальные данные[5,6].

Литература

1. Иванов В.В., Шкерин С.Н., Липилин А.С., Никонов А.В., Хрустов В.Р., Ремпель Ал.А. Электропроводность твердого электролита на основе диоксида циркония с размером зерна керамики в субмикронном диапазоне // Электрохимическая энергетика 2010 т. 10 №1 С.3-10
2. Радченко Р.В., Мокрушин А.С., Тюльпа В.В. Водород в энергетике. Учебное пособие. Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2014. — 229, [3] с.
3. Zacate M.O., Minervini L., Bradfield D.J., Grimes R.W., Sickafus K.E. Defect cluster formation in M_2O_3 -doped cubic ZrO_2 // 2000 Solid State Ionics 128 P. 245
4. Dick B.G., Overhauser A.W. Theory of the Dielectric Constants of Alkali Halide Crystals // 1958 Phys. Rev. 112 90-103
5. Rosa C.J. and Hagel W.C. Oxygen-ion diffusivity in hypostoichiometric zirconium dioxide // 1968 J. Nucl. Mater. 27 12–20
6. Pawel R.E. and Campbell J.J. The Oxidation of Pure Zirconium in Steam from 1000° to 1416°C // 1981 J. Electrochem. Soc. 128 1999-2005

УДК 538.911

Исследование борида вольфрама при помощи T-USPEX

Я.В. Пропад¹, И.А. Круглов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

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

До сегодняшнего дня применение методов предсказания кристаллических структур было возможно только при нулевой температуре, что ограничивало исследование высокотемпературных фаз материалов, потенциально обладающих различными уникальными свойствами. В нашей работе мы представляем новый метод предсказания структуры веществ при конечных температурах и давлениях T-USPEX, основанный на эволюционном алгоритме USPEX [1]. При помощи данного метода можно найти стабильные кристаллические структуры при заданных P-T условиях для любого количества типов атомов.

На первом шаге T-USPEX создает случайную структуру, которая затем релаксируется при конечной температуре с использованием молекулярной динамики (МД) в NPT-ансамбле. По сравнению с USPEX, релаксация кристаллической структуры и расчет свободной энергии выполняются в рамках МД, поэтому для расчета необходима суперячейка (более 1000 атомов), следовательно,

необходимо использовать межатомный потенциал. Если для данной системы известен хороший классический потенциал, то он может быть применен в МД, однако для большинства систем такого потенциала не существует. В этом случае мы используем потенциал на основе машинного обучения, обученный на *ab initio* данных. На данный момент существуют разные межатомные потенциалы на основе машинного обучения, различающиеся способами задания дескрипторов для описания ячейки и самим алгоритмом обучения. В нашей работе мы использовали МТР-потенциал, являющийся одним из самых вычислительно быстрых и точных [2]. Для всех полученных структур рассчитываются поправки к давлению из DFT. Значения поправок передаются на следующий шаг алгоритма для оптимизации структуры в МД-расчете с учетом заданных температуры, давления и поправок, в ходе которого получается финальная структура с параметрами решетки, соответствующими данным Р-Т условиям. На рис. 1 представлен пример получения финальной структуры: случайная структура переходит в наиболее стабильную фазу при температуре 1000 К и давлении 0 ГПа — $I4_1/amd$ -WB.

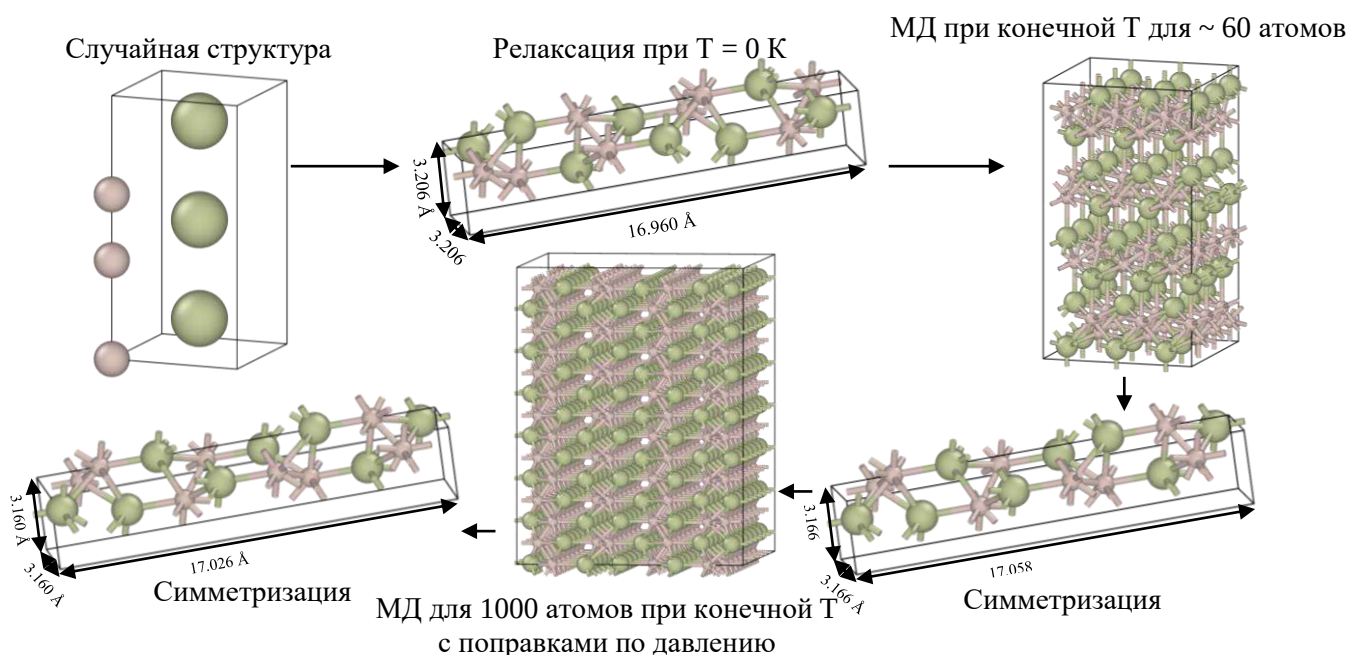


Рис. 1. Пример эволюции случайно сгенерированной структуры WB после релаксации при $T = 1000$ К и $P = 0$ ГПа при помощи алгоритма T-USPEX.

Для полученных финальных структур проводится расчет свободной энергии с помощью метода термодинамического интегрирования с учетом поправок по энергии. Далее происходит работа эволюционного алгоритма по отбору лучших по энергии структур и создания нового поколения, как в оригинальном алгоритме USPEX, и для нового поколения по описанной выше схеме происходит расчет равновесной кристаллической структуры и свободной энергии.

Алгоритм T-USPEX был протестирован на системе борида фольфрама в диапазоне температур 500К—3000 К при нулевом давлении. Обучающая выборка для каждого потенциала МТР состояла из 10% структур, выбранных из 5-пс траектории молекулярной динамики. В заданном диапазоне температур было найдено две наиболее устойчивые структуры: $I4_1/amd$ α -WB и $Cmcm$ β -WB, известные ранее, а также $Pnma$ -WB. На рис. 2 видно, что при нулевом давлении при температуре до 2823 К фаза $I4_1/amd$ -WB, или α -WB, более термодинамически устойчива, чем $Cmcm$ -WB, или β -WB.

Фаза *Pnma*-WB во всём исследуемом диапазоне температур оказалась выше по энергии по сравнению с другими найденными фазами.

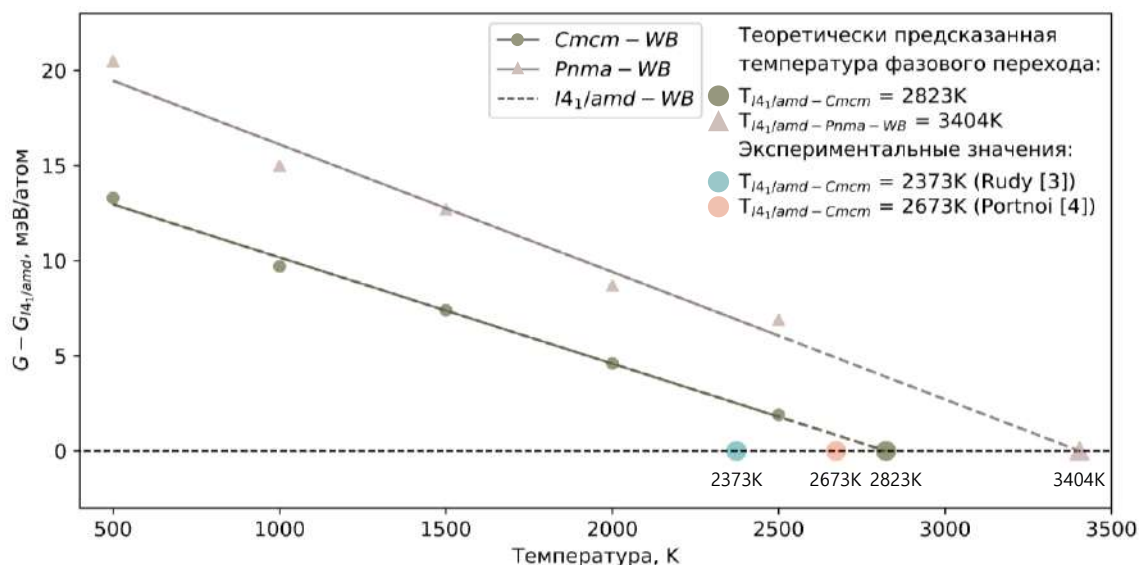


Рис. 2. Разница свободных энергий различных фаз WB при $P = 0$ ГПа.

Предсказанное значение температуры фазового перехода из *I4₁/amd*-WB в *Cmcm*-WB близко к ранее теоретически рассчитанным [3] и экспериментальным значениям температуры фазового перехода, находящимися в диапазоне 2100–2800 К, что показано в работах [4], [5].

Таким образом, с помощью T-USPEX удалось обнаружить при разных температурах экспериментально известные фазы борида вольфрама и рассчитать температуру перехода из одной фазы в другую. В дальнейшем планируется тестирование алгоритма T-USPEX на системах, состоящих из двух и более типов атомов, а также усовершенствование алгоритма — выбор оптимальной стратегии обучения потенциала, внедрение активного обучения, повышение точности расчета свободной энергии.

Работа выполнена при поддержке РФФИ № 19-73-00237.

Литература

1. Glass C.W., Oganov A.R., Hansen N. USPEX — Evolutionary crystal structure prediction // Comput. Phys. Commun. 2006. V. 175. P. 713–720.
2. Zuo Y., Chen C., Li X., Deng Z., Chen Y., Behler J., Csányi G., Shapeev A. V., Thompson A.P., Wood M.A., Ong S.P. Performance and Cost Assessment of Machine Learning Interatomic Potentials // J. Phys. Chem. A. 2020. V. 124. Is. 4. P. 731–745.
3. Kvashnin A.G., Samtsevich A.I. Phase transitions in tungsten monoborides // Letters to Journal of Experimental and Theoretical Physics. 2020. V. 111. Is. 6. P. 380 – 387.
4. Rudy E. Experimental phase equilibria of selected binary, ternary and higher ordinary systems // AMFL-TR-69-117. 1969. Part V. P. 8.
5. Portnoi K.I., Romashov V.M., Levinskii Y.V., Romanovich I.V. Phase diagram of the system tungsten-Boron. 1967. Soviet Powder Metallurgy and Metal Ceramics. V. 6(5). P. 398–402.

УДК 538.9

Коллективные движения атомов в твёрдых телах

В.Д. Негодин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Объединённый институт высоких температур РАН

Работа [1] продолжает [2] в изучении коллективных движений частиц в расплаве металла. Подробнее исследовано поведение коррелятора в кристалле, обнаружено гистерезисо-подобное поведение значений коррелятора при переходе «твёрдое тело – жидкость» и обратно. Изучена радиальная зависимость коррелятора и проведено сравнение с радиальной функцией распределения.

Настоящая работа продолжает начатое в [3] исследование четырёхточечного коррелятора Леннард-Джонсовской системе частиц.

Четырёхточечная корреляционная функция для изучения коллективной динамики системы имеет вид:

$$CC(T, R, \tau) = \left\langle \frac{[\vec{r}_i(t + \tau) - \vec{r}_i(t)] \cdot [\vec{r}_k(t + \tau) - \vec{r}_k(t)]}{|\vec{r}_i(t + \tau) - \vec{r}_i(t)| \cdot |\vec{r}_k(t + \tau) - \vec{r}_k(t)|} \right\rangle_R = \langle \cos \varphi(t) \rangle_R,$$

где $\vec{r}_i(t)$, $\vec{r}_k(t)$ – радиус-векторы частиц i и k , находящихся на расстоянии $R \pm \delta$ в начальный момент времени t . Угловые скобки $\langle \dots \rangle_R$ означают усреднение по всем парам частиц, удовлетворяющим условию начального расстояния между ними. Зависимость коррелятора от температуры не явная. Значения коррелятора трактуются как мера согласованности движения частиц.

Исследовались системы, состоящие минимум из $N = 16384$ частиц в периодических граничных условиях по осям x , y , z . Указанные расчёты проводились не менее 10 статистически независимых раз для каждого набора параметров.

На рис. 1 красным цветом показана температурная зависимость коррелятора для перехода «твёрдое тело – жидкость». R выбран на первой координационной сфере. Как уже описывалось в [3], наблюдается рост коррелятора в стабильной области твёрдого тела, а в области излома происходит распад кристалла. Также на рис. 1 изображены значения коррелятора для жидкой фазы в зависимости от температуры. В целом демонстрируется явление гистерезиса в значениях коррелятора при движении в разные стороны по температуре. Стрелками показаны возможные направления изменения значений коррелятора при изменении температуры системы (стрелки красного и синего цвета соответственно). Так, система, находящаяся в состоянии стабильного или метастабильного кристалла, может быть обратимо нагрета или охлаждена с сохранением значений коррелятора до тех пор, пока не произойдёт необратимый скачок при температуре распада кристалла. Далее при охлаждении система будет обратимо двигаться по пути перехода «жидкость – переохлаждённая жидкость» при изменении температуры вплоть до некоторой температуры, при которой система кристаллизуется. Коррелятор установится на значениях, не соответствующих стабильному кристаллу. Это объясняется различиями в структуре кристаллов: изначально создающийся кристалл имеет правильную структуру по всему объёму, а кристалл, получающийся при кристаллизации жидкости, обычно состоит из нескольких частей с разными ориентациями решётки или даже в разных кристаллических фазах.

Радиальная зависимость коррелятора для кристаллической системы изображена на рис. 2 красным цветом. Пики зависимости соответствуют высокой корреляции частиц, находящихся на определённом расстоянии друг от друга. Отрицательные значения коррелятора указывают на противокорреляции частиц на данном расстоянии R . Проведено сравнение с радиальной функцией распределения, изображённой чёрным цветом. Видно, что пики обоих графиков совпадают, однако график $CC(R)$ демонстрирует большую амплитуду и детектирует незаметные на $g(R)$ максимумы и минимумы. То есть коррелятор $CC(R)$ оказывается более чувствительным инструментом исследования кристаллической решётки.

Таким образом, изучено поведение коррелятора в области перехода «жидкость – твёрдое тело» в обоих направлениях в Леннард-Джонсовской системе частиц. Обнаружено явление гистерезиса значений в исследуемом переходе. Проведено сравнение радиальной зависимости коррелятора и радиальной функции распределения, в котором первая показала себя как более чувствительный детектор корреляций положений частиц в конденсированной среде.

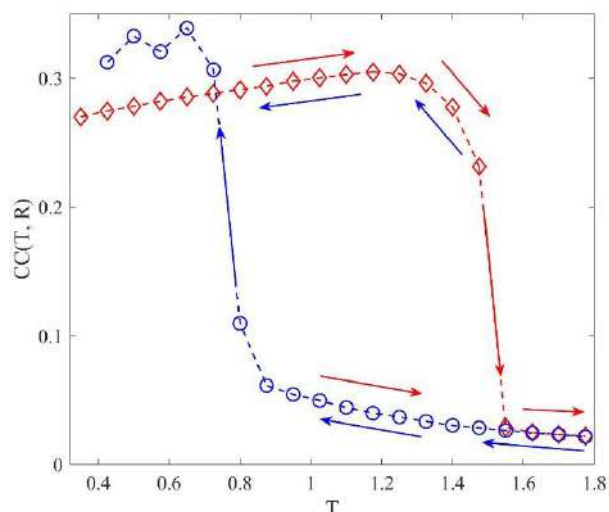


Рис. 1. График зависимости значений коррелятора от температуры при движении от стабильного кристалла к перегретому (красным цветом) и далее от стабильной жидкости к переохлаждённой (синим цветом). Стрелками показано возможное изменение $CC(T, R)$ при изменении температуры.

Плотность системы $\rho = 1.0$, число частиц $N = 16384$.

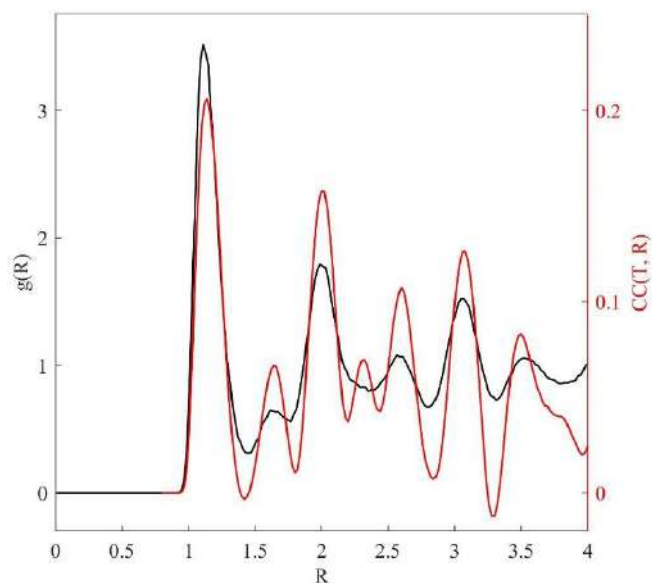


Рис. 2. График радиальной зависимости коррелятора (красным цветом) и сравнение с радиальной функцией распределения (синим цветом) $g(R)$. Плотность системы $\rho = 0.9$, температура $T = 0.6$ число частиц $N = 16384$.

Литература

1. Норман Г.Э., Флейта Д.Ю. Коллективные движения атомов в перегретом кристалле и переохлажденном расплаве простого металла. // Письма в ЖЭТФ. 2020. Т. 111(4). С. 251.
2. Норман Г.Э., Писарев В.В., Флейта Д.Ю. Особенность в точке перехода от равновесной к метастабильной фазе металлического расплава. // Письма в ЖЭТФ. 2019. Т. 109(10). С. 689.
3. Негодин В.Д. // Особенность коллективного поведения Леннард-Джонсовской системы в окрестности точки фазового перехода кристаллизации. // Труды 62-й научной конференции МФТИ. Фундаментальная и прикладная физика. 2019. С. 219-222.

Консервативный остаток пролина в трансмембранных доменах рецепторов семейства IR: структурная и функциональная роль

А.Р. Идиятуллина¹, А.С. Кузнецов^{1,2}, Я.В. Бершацкий², Р.Г. Ефремов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

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

Семейство IR включает в себя три белка: рецептор инсулина, рецептор инсулиноподобного фактора роста 1 (IGF-1R) и рецептор, подобный рецептору инсулина (IRR). Все они выполняют важные биологические функции: рецептор инсулина отвечает за регуляцию гомеостаза глюкозы, IGF-1R — за рост и развитие организма, IRR — за регуляцию щелочного баланса. Известно, что трансмембранный домен может играть важную роль в активации этих рецепторов. При этом изучение его поведения в мембране с помощью прямых экспериментов затруднено, поэтому активно используют компьютерное моделирование.

В лаборатории ЯМР-спектроскопии ИБХ РАН были получены новые структурные данные в мицеллах, указывающие на важную структурную роль консервативных остатков пролина, расположенных в трансмембранных доменах данных рецепторов, однако молекулярные аспекты их влияния на поведение белка в мембране неясны. Цель настоящей работы — с помощью моделирования оценить поведение пептидов в липидных бислоях разного состава.

Были описаны структурно-динамические параметры мономеров трансмембранных доменов в явно заданном липидном бислое с помощью метода молекулярной динамики. Рассматривали конформации белка, удовлетворяющие ЯМР-данным, сравнивали геометрические параметры, описывающие положение трансмембранных сегментов в мембране. Белок встраивали в явно заданную модельную мембрану — бислой из молекул дипальмитоилфосфатидилхолина (ДПФХ) — добавляли молекулы воды и ионы. Для расчёта траекторий молекулярной динамики использовали программный пакет GROMACS.

В результате показали, что конформации трансмембранных доменов, наблюдаемые в ЯМР в мицеллах, сохраняются в липидном бислое. При этом остаток пролина обеспечивает повышенную подвижность N-концевого фрагмента пептидов, что особенно характерно для фрагментов рецептора инсулина и IRR. Полученные данные могут помочь в понимании механизма активации рецепторов семейства IR в норме и патологии.

Литература

1. Kuznetsov A., Zamaletdinov M., Bershatsky Y., Urban A., Bocharova O. V., Bennasroune A., Maurice P., Bocharov E. V., Efremov R. Dimeric states of transmembrane domains of insulin and IGF-1R receptors: Structures and possible role in activation // *Biochimica et Biophysica Acta - Biomembranes*. 2020. Vol. 1862. No. 11. P. 183417

Механизм связывания лантибиотиками галлидермин и эпидермин пирофосфатной группы липида II

А.Х. Тальдаев¹, И.С. Панина^{2,3}, Р.Г. Ефремов^{2,3,4}

¹Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский университет)

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

³Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

⁴Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В связи с распространением антибиотикорезистентных инфекций особый интерес представляет поиск и разработка новых антибактериальных препаратов. Перспективным объектом таких исследований является группа природных антимикробных пептидов (АМП) — лантибиотиков. Мишенью большинства известных лантибиотиков является пирофосфатная часть липида II — молекулы, имеющей ключевое значение в строительстве клеточной стенки бактерий. Низин — наиболее известный представитель АМП данного класса, состоящий из 34 аминокислотных остатков (Рис. 1).

Ранее для него были охарактеризованы механизм связывания с липидом II и пространственная организация комплекса (PDB ID: 1WCO) в ДМСО (диметилсульфоксиде), а также конформация «ловушки» в водном окружении [1, 2]. Галлидермин и эпидермин, также относящиеся к группе лантибиотиков и содержащие меньше нестандартных аминокислот (Рис. 1), обладают превосходящей низин активностью *in vitro* и *in vivo* [3]. У вышеперечисленных лантибиотиков в связывании участвуют первые 12 аминокислотных остатков, формирующие 2 кольцевых фрагмента. С целью дизайна новых АМП с улучшенными свойствами и упрощенным строением необходимо исследовать механизм связывания лантибиотиков галлидермина и эпидермина с пирофосфатом липида II.

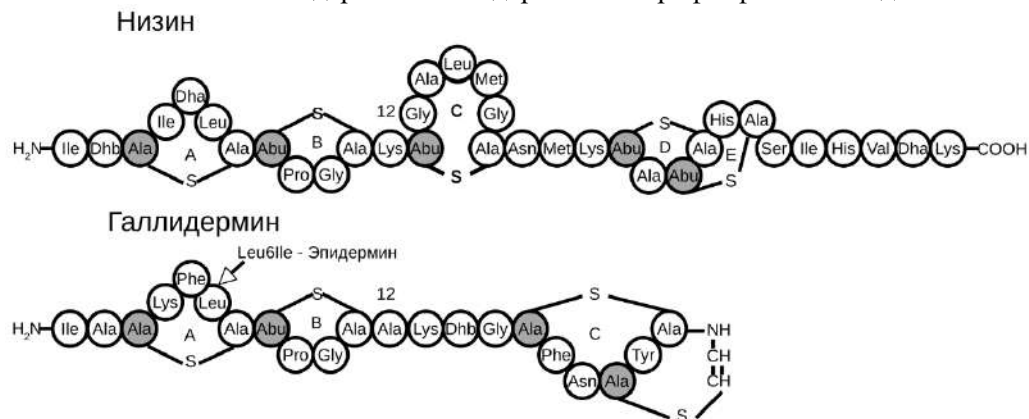


Рис. 1. Схематичное изображение структур низина, галлидермина и эпидермина. Ala-S-Ala — лантионин, Abu-S-Ala — метиллантионин, Dha — дегидроаланин, Dhb — дегидроаминобутерин. Серым цветом показаны D-аминокислоты. Латинскими буквами А–Е обозначены кольцевые фрагменты в составе пептидов.

Настоящее исследование было проведено с помощью метода классической молекулярной динамики (МД). Пирофосфатную группу липида II имитировали ионы диметилпирофосфата (ДМПФ). Системы состояли из одной укороченной пептидной последовательности лантибиотика с 1 по 12 аминокислотный остаток, в присутствии 3 ионов ДМПФ и без, воды и противоионов. Моделирование проводили в пакете GROMACS версии 2019.6 [4] в модифицированном силовом поле Gromos 43a2x с моделью воды SPC. Для создания суммарного нейтрального заряда в систему были добавлены ионы натрия. Далее проводили минимизацию энергии методом сопряженных градиентов (1000 шагов) и нагрев системы при 315 K в течение 200 пс с шагом 1 фс. Постоянство длин ковалентных связей в ходе расчетов осуществляли с помощью алгоритма LINCS. Время продуктивной молекулярной динамики составляло 500 нс с шагом 2 фс с применением периодических граничных условий. Для каждой системы выполнили пять расчетов МД с независимыми стартами.

Без присутствия ионов ДМПФ галлидермин₁₋₁₂ и эпидермин₁₋₁₂ образуют 4 стабильные конформации, наиболее заселенный кластер галлидермина₁₋₁₂ существует ~34% времени моделирования, эпидермина₁₋₁₂ — ~46%. Напротив, в присутствии ионов ДМПФ отмечается один наиболее заселенный и стабильный кластер, существующий ~85% и ~88% времени моделирования у галлидермина₁₋₁₂ и эпидермина₁₋₁₂, соответственно. В ходе каждого расчета МД было показано, что лантибиотики создают устойчивый комплекс с одной молекулой ДМПФ. В среднем галлидермин₁₋₁₂ образует с ДМПФ 5-6, а эпидермин₁₋₁₂ — 6-7 водородных связей. Это коррелирует с экспериментальными данными о более высокой активности эпидермина по сравнению с галлидермином [3]. Данные конформации напоминают ранее описанную форму «ловушки» низина (Рис. 2а), однако незначительно отличаются от него взаимным расположением колец А и В. Также важно отметить, что амидный протон 5-го аминокислотного остатка галлидермина₁₋₁₂ и эпидермина₁₋₁₂ направлен в сторону первого кольца (Рис. 2б). Предположительно, это может являться причиной большей активности данных лантибиотиков по сравнению с низином.

а)

б)



Рис. 2. а) Конформация из наиболее заселенного кластера низина₃₋₁₂ [2], окраска в псевдоцветах. б) Суперпозиция наиболее вероятных конформаций низина₃₋₁₂ (серый), галлидермина₃₋₁₂ (розовый цвет) и эпидермина₃₋₁₂ (бирюзовый цвет), образующихся в присутствии ДМПФ.

Таким образом, было показано, что галлидермин₁₋₁₂ и эпидермин₁₋₁₂ образуют устойчивый комплекс с ионом ДМПФ, имитирующим основную детерминанту связывания с липидом II. У всех лантибиотиков низинового типа имеется одна сходная активная конформация, которая частично изменяется в зависимости от аминокислотного состава.

Литература

1. Hsu S.T., Breukink E., Tischenko E., Lutters M.A., de Kruijff B., Kaptein R., Bonvin A.M., van Nuland N.A. The nisin-lipid II complex reveals a pyrophosphate cage that provides a blueprint for novel antibiotics // Nat. Struct. Mol. Biol. 2004. V. 11(10). P. 963.
2. Panina I., Krylov N., Nolde D., Efremov R., Chugunov A. Environmental and dynamic effects explain how nisin captures membrane-bound lipid II // Sci. Rep. 2020. V. 10. P. 8821.
3. Bonelli R.R., Schneider T., Sahl H.G., Wiedemann I. Insights into in vivo activities of lantibiotics from gallidermin and epidermin mode-of-action studies // Antimicrob. Agents Chemother. 2006. V. 50(4). P. 1449.
4. Abraham M.J., Murtola T., Schulz R., Páll S., Smith J.C., Hess B., Lindahl E. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers // SoftwareX. 2015. V. 1-2. P. 19.

УДК 534.16

Моделирование низкоэнергетической динамики решетки высших боридов и интерметаллидов с разной иерархией масс

Д.А. Серебrenников¹, Е.С. Клементьев¹

¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта

Кристаллические соединения на основе ковалентных химических связей склонны к образованию трехмерного каркаса в виде связанных между собой кластеров атомов. Наиболее ярким примером может служить кварц, кристаллическая структура которого представляется в виде тетраэдрических блоков SiO₄, связанных друг с другом общими атомами кислорода, расположенными в вершинах тетраэдров. В серии работ [1,2] было показано, что межатомные силы, действующие непосредственно в пределах кластера оказываются значительно более сильными по сравнению с силами, ответственными за связь кластеров друг с другом. Данный факт позволил применить методы молекулярной динамики для моделирования динамики решетки данного соединения и, в частности, проанализировать мягкие моды, ответственные за фазовый переход из тригональной α-фазы в гексагональную β-фазу кварца.

Схожая кристаллическая структура наблюдается во множестве других соединений, например, высших боридов, где атомы бора группируются в виде октаэдров (в структурах типа CaB₆, рис 1.) или, например, кубооктаэдров (в структурах типа UB₁₂). Методами неупругого рассеяния нейтронов и изотопического контраста в работе [3] было показано, что низкоэнергетическая динамика ряда соединений, относящихся к классу высших боридов, определяется, в основном, тепловыми колебаниями атомов металла, в то время как высокоэнергетические осцилляции связаны с колебаниями атомов бора. Для анализа низкоэнергетической области динамики решетки подобных соединений авторами настоящей работы было предложено использовать модель суператома, в рамках которой группа сильно связанных атомов заменяется на «суператом» с массой, равной сумме масс атомов, входящих в кластер [4]. Моделирование производится в рамках феноменологической модели Борна

фон Кармана, подразумевающей использование матричных компонент потенциала межатомного взаимодействия как непосредственно варьируемых параметров. Таким образом, в случае центральных сил каждое взаимодействие описывается всего двумя силовыми константами:

$$L = \frac{d^2 V(kN, k'N')}{dr_0^2}, T = \frac{1}{r_0} \frac{dV(kN, k'N')}{dr_0} \quad (1)$$

$$r_0 = r_0(k, N) - r_0(k', N') \quad (2)$$

где L – продольная константа, T – поперечная константа, $r_0(k, N)$ и $r_0(k', N')$ – положения равновесия атомов (k, N) и (k', N') соответственно, описываемых радиус-вектором $r(t) = r(k) + r(N)$.

В данной работе приводятся результаты моделирования низкоэнергетической динамики решетки как высших боридов, относящихся к классу гекса- и додекаборидов, так и интерметаллических соединений типа фаз Лавеса. Исследуются границы применимости модели суператома, приводится сравнение модельных спектров плотности фононных состояний, дисперсии фононов с экспериментальными данными. В работе ставится вопрос, можно ли использовать модель суператома для каркасно-кластерных кристаллических систем без сильной иерархии взаимодействий, но с сильной разницей масс атомов. В заключении приводятся расчеты, демонстрирующие примерный диапазон температур, в которых можно описывать теплоемкость исследуемых систем в рамках используемого приближения.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, грант 19-02-00953-а.

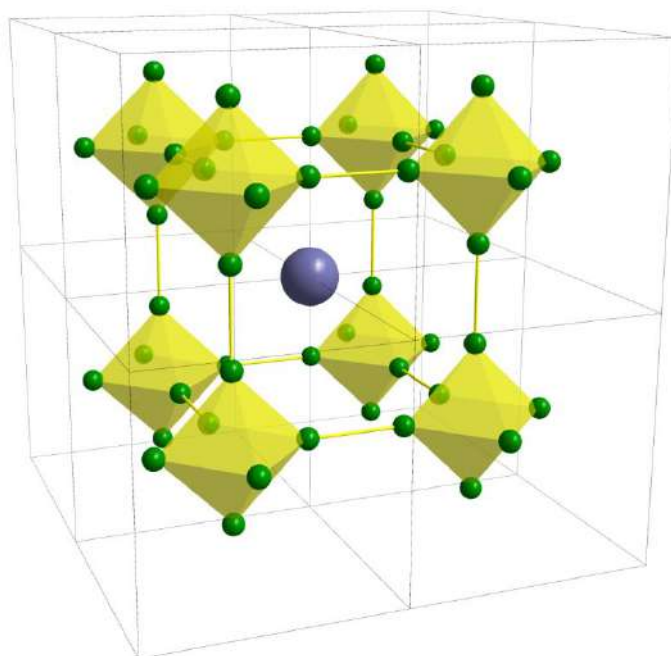


Рис. 1. Кристаллическая структура гексаборидов (структурный тип CaB_6)

Литература

1. Dove M.T., Giddy A., Heine V. On the application of mean-field and landau theory to displacive phase transition // *Ferroelectrics* 1992. V. 136. P. 33.
2. Giddy A., Dove M.T., Pawley V., et al. The determination of rigid-unit modes as potential soft modes for displacive phase transitions in framework crystal structures // *Acta Cryst.* 1993. V. A49. P. 697.
3. Alekseev P.A. High borides: determining the features and details of lattice dynamics from neutron spectroscopy // *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* 2015. V. 58. P. 330.
4. Serebrennikov D.A., Clementyev E.S., Alekseev P.A. Analysis of the crystal lattice instability for cage-cluster systems using the superatom model // *JETP* 2016. V. 3. P. 452.

Молекулярно-динамическая модель кристалла лизоцима

Ю.А. Поляченко^{1,2}, Н.Д. Кондратюк,^{2,1} В.В. Стегайлов^{2,1}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Всестороннее изучение белков может быть полезно в широком круге задач, стоящих сейчас перед человечеством, т.к. белки - тип биомолекул, выполняющих основную часть функций в клетке. Лучшее понимание устройства белков может способствовать, например, разработке новых методов исправления их неправильной работы, что значило бы излечение многих серьезных болезней. На сегодняшний день существуют методы определения последовательности белков, работающие по большей части в автоматическом режиме и не требующие больших затрат ресурсов. Но для глубокого понимания устройства белка необходимо знать не только его аминокислотную последовательность, но и трехмерную структуру. Метод кристаллографии, считающийся сейчас классическим для определения 3D-структуры белков, уже менее тривиален в реализации. Одна из главных сложностей в нем - необходимость кристаллизации белка для его исследования. Кристаллизация белков часто сопряжена с созданием необычных и при этом строго контролируемых физических условий, что уже говорит о сложности процесса. Иногда же в силу особенностей конкретной молекулы ее кристаллизация вообще не представляется возможной. В таких случаях кристаллизация может быть проведена с заменой частей белка, мешающих ей. Это опять же многократно усложняет процесс, т.к. нужно предпринимать попытки кристаллизации многих подобных белков.

Методы молекулярного моделирования активно используются для поиска мутаций, способствующих кристаллизации белка. Однако возможная роль молекулярного моделирования не исчерпывается этими вопросами. В данной работе рассматривается молекулярно-динамическая (МД) модель белкового кристалла для того, чтобы доведя ее до совершенства интерпретировать на ее основе экспериментальные измерения макроскопических свойств подобных кристаллов.

В рамках данной работы была построена МД модель кристалла лизоцима. Проанализированные различные варианты нейтрализации системы и влияние pH [1,2]. Исследована зависимость равновесной влажности от температуры кристалла. Исследованы вопросы сходимости при расчете макроскопических свойств кристалла в рамках МД модели.

Литература

1. *Sondergaard, Chresten R., Mats HM Olsson, Michal Rostkowski, and Jan H. Jensen.* "Improved Treatment of Ligands and Coupling Effects in Empirical Calculation and Rationalization of pKa Values." *Journal of Chemical Theory and Computation* 7, no. 7 (2011): 2284-2295. doi:10.1021/ct200133y
2. *Olsson, Mats HM, Chresten R. Sondergaard, Michal Rostkowski, and Jan H. Jensen.* "PROPKA3: consistent treatment of internal and surface residues in empirical pKa predictions." *Journal of Chemical Theory and Computation* 7, no. 2 (2011): 525-537. doi:10.1021/ct100578z

Молекулярно-динамический расчет свойств н-додекана

Б.И. Никитюк^{1,2}, Н.Д. Кондратюк^{1,2}, В.В. Писарев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

В работе изучается применимость полноатомного потенциала OPLS-AA [1] с оптимизацией зарядов на атомах на сервере LigParGen [2,3,4] для расчета свойств н-додекана C₁₂H₂₆. Существует множество межатомных потенциалов, направленных на различные классы задач. При этом ряд потенциалов дает ошибку при вычислении транспортных коэффициентов в жидкостях при больших давлениях [5]. Наиболее точные результаты дают модели, более подробно описывающие внутримолекулярные взаимодействия, такие как COMPASS [6,7], которые при этом являются более вычислительно сложными. Поэтому представляет интерес проверка применимости новых вариантов потенциалов в экстремальных условиях.

Исследование ведется методом молекулярной динамики (МД) с помощью пакета LAMMPS [8]. Размер рассматриваемой системы – 125 молекул. Зависимость плотности от давления получена по равновесной МД траектории длиной 1 нс. Вязкость рассчитывается по равновесной МД траектории длиной 3 нс. Шаг интегрирования – 1 фс.

Для расчета вязкости используется метод Грина-Кубо, позволяющий получить вязкость как интеграл автокорреляционной функции недиагональных компонент тензора напряжений системы. Известна проблема сходимости этого интеграла. Для обеспечения сходимости используется метод временной декомпозиции [9], позволяющий получить значение интеграла, как среднее по нескольким независимым МД траекториям. Полученные данные сравниваются с экспериментальными значениями, доступными до давлений 200 МПа [10].

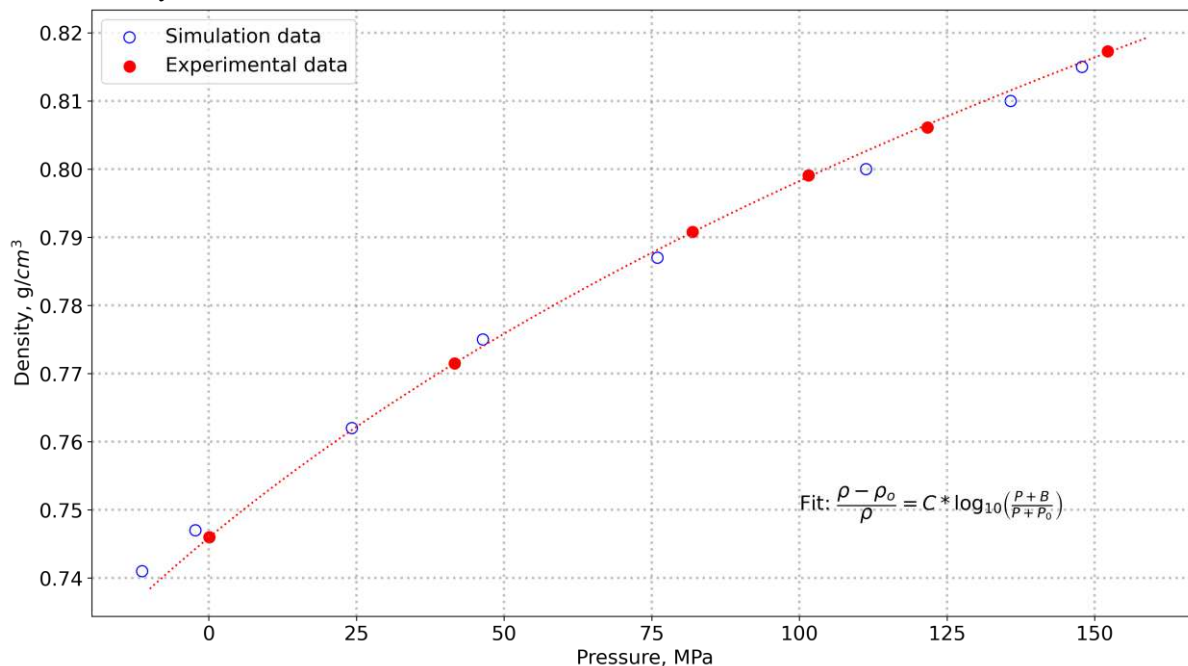


Рис. 1. Зависимость плотности н-додекана от давления: красные точки – экспериментальные данные [10], синие круги – результаты расчета в данной работе.

На рис. 1 изображена полученная зависимость плотности и экспериментальные данные по плотности. Красными точками обозначены экспериментальные данные, красной пунктирной линией – аппроксимация зависимости [10], синими незаполненными точками – полученные в работе данные.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект 17-79-20391).

Литература

1. Jorgensen W.L., Maxwell D.S., Tirado-Rives J. Development and testing of the OPLS all-atom force field on conformational energetics and properties of organic liquids // J. Am. Chem. Soc. 1996, V. 118, N. 45 P. 11225–11236
2. Jorgensen W.L., Tirado-Rives J. Potential energy functions for atomic-level simulations of water and organic and biomolecular systems // PNAS 2005 V. 102, N.19 P.6665-6670
3. Dodda L.S., Vilseck J.Z., Tirado-Rives J., Jorgensen W.L. 1.14* CM1A-LBCC: localized bond-charge corrected CM1A charges for condensed-phase simulations // J. Phys. Chem. 2017. V. 121, N. 15 P. 3864-3870
4. Dodda L.S., Cabeza de Vaca I., Tirado-Rives J., Jorgensen W.L. LigParGen web server: an automatic OPLS-AA parameter generator for organic ligands // Nucleic Acids Res.. 2017. V. 45, N.W1 P. W331-W336
5. Kondratyuk N.D., Norman G.E., Stegailov V.V. Self-consistent molecular dynamics calculation of diffusion in higher n-alkanes // J. Chem. Phys. 2016. V. 145, N.20 P. 204504
6. Sun H. COMPASS: An ab Initio Force-Field Optimized for Condensed-Phase Applications s Overview with Details on Alkane and Benzene Compounds // J. Phys. Chem. 1998. V. 5647, N. 98. P. 7338–7364
7. Kondratyuk N.D., Pisarev V.V. Calculation of viscosities of branched alkanes from 0.1 to 1000 MPa by molecular dynamics methods using COMPASS force field // Fluid Phase Equilib. 2019. V. 498, P. 151-159
8. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comp. Phys. 1995. V. 117, N. 1 P. 1-19

9. Zhang Y., Otani A., Maginn E.J. Reliable viscosity calculation from equilibrium molecular dynamics simulations: A time decomposition method // J. Chem. Theory Comput. 2015. V. 11, N. 8 P. 3537-3546
10. Caudwell D.R., Trusler J.P., Vesovic V., Wakeham W.A. The viscosity and density of n-dodecane and n-octadecane at pressures up to 200 MPa and temperatures up to 473 K // Int. J. Thermophys. 2004. V. 25, P. 1339-1352

УДК 538.9

Молекулярно-динамическое моделирование точечных дефектов вюстита

Н.А. Фоминых^{1,2}, М.И. Шутикова^{1,2}, В.В. Стегайлов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Точечные дефекты влияют на различные свойства твердых тел: электрические, прочностные, оптические. От их концентрации и подвижности зависят электропроводность, процессы самодиффузии и параметры фазовых переходов в кристаллах. Для оценки концентрации точечных дефектов в кристалле, находящемся в состоянии равновесия, вводят величину, называемую энергией образования дефекта: E_f^V . Равновесная концентрация c_V дефектов в этом случае: $c_V \sim \exp(-E_f^V/kT)$.

Энергию образования дефекта (например, вакансии) можно вычислить методом молекулярной статистики. В этом подходе используется приближение сверхячеек, а E_f^V определяется по формуле

$$E_f^V = E_V - E_0 + \mu, \quad (1)$$

где E_V и E_0 - полная энергия дефектной и бездефектной конфигураций соответственно, а μ - химический потенциал атома, который был удален при образовании вакансии. Аналогично можно вычислить энергии образования других типов точечных дефектов (собственных междоузельных и примесных атомов). Этот метод, однако, имеет ряд недостатков.

С другой стороны, используя молекулярно-динамическое моделирование, можно непосредственно вычислить концентрации точечных дефектов в заданном интервале температур и давлений [1].

В докладе будут представлены результаты расчетов равновесной концентрации точечных дефектов, полученные этими двумя способами. В качестве модельной системы рассматривается оксид железа с межатомным взаимодействием, задаваемым потенциалом Терсоффа [2]. Будет проведено сопоставление результатов статического и динамического подхода, сделаны выводы о границах применимости формулы (1) и возможности обобщения метода, предложенного в работе [1], на двухкомпонентные системы.

Работа выполняется при поддержке РФФИ (грант 20-21-00159).

Литература

1. Smirnov G.S., Stegailov V.V. Formation free energies of point defects and thermal expansion of bcc U and Mo // J. Phys. Condens. Matter. 2019. Vol. 31, № 23. P. 235704.
2. Byggmästar J. [et al.] Analytical interatomic bond-order potential for simulations of oxygen defects in iron // J. Phys. Condens. Matter. 2019. Vol. 31, № 21. P. 215401.

УДК 538.9

Образование каскадов смещений в хромите

М.С. Шеверев¹, В.В. Стегайлов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Рассматривается образование каскадов смещений, возникающих при выбивании потоком нейтронов атомов из кристаллической решетки хромита (FeCr_2O_4). Исследование ведется методом молекулярной динамики [1][2]. Для описания взаимодействия атомов в веществе используется потенциал Букингема с кулоновским членом [3]. Для описания кулоновского взаимодействия используются методы Р³М и РМЕ. Для визуализации и обработки результатов моделирования используется пакет Ovito [4].

Исследование радиационных повреждений материалов — важная фундаментальная проблема современного материаловедения. Одним из основных проявлений радиационного воздействия является генерация каскадов атомных смещений в материале, возникающих при столкновениях распадающихся частиц с атомами кристаллической решетки. Для таких исследований активно применяется метод молекулярной динамики [5][6].

Данная работа направлена на построение численной модели, позволяющей оценивать изменения, происходящие в структуре хромита в присутствии радиационного фона, сравнение влияния на свойства хромита этих изменений по сравнению с изменениями, вызываемыми другими процессами, такими как, например, диффузия. Также проводится сравнение различных платформ для молекулярно-динамических расчетов.



Рис.1. Треки выбитых частиц, построенные с помощью программы Ovito.

Хромит, как и некоторые другие оксиды, образуется на поверхности легированных сталей в результате их окисления. Свойства поверхности таких сталей могут значительно влиять на применимость этих сталей для тех или иных задач, например на возможность их использования в реакторах нового поколения [6]. Исследование процессов в таких оксидах и их свойств может занимать продолжительное время и быть достаточно ресурсоемким. Однако применение методов молекулярной динамики может, в перспективе, значительно оптимизировать исследование свойств поверхностей таких сталей, снижая количество необходимых экспериментальных данных до небольшого набора контрольных измерений, подтверждающих корректность численной модели. При этом может быть получена важная статистика, которую невозможно получить другими методами.

Работа проведена при поддержке РФФИ (грант №20-21-00159).

Литература

1. Gibson J. B. et al. Dynamics of radiation damage //Physical Review. – 1960. – Т. 120. – №. 4. – С. 1229.
2. Khiara N. et al. A novel displacement cascade driven irradiation creep mechanism in α -zirconium: A molecular dynamics study //Journal of Nuclear Materials. – 2020. – Т. 541. – С. 152336.
3. J. Vaari Molecular dynamics simulations of vacancy diffusion in chromium(III) oxide, hematite, magnetite and chromite //Solid State Ionics. Elsevier. – 2015. – V. 270. – P. 10 – 17.
4. A. Stukowski, Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool //Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. – 2010. – V. 18. – P. 015012.
5. K. P. Zolnikov et al. Molecular dynamics simulation of primary radiation damage in Fe–Cr alloy // J. Phys.: Conf. S. – 2016. – V. 774. – P. 012130.
6. M. Abu-Shams, W. Haider, I. Shabib Evolution of displacement cascades in Fe–Cr structures with different [001] tilt grain boundaries //Radiation Effects and Defects in Solids, Incorporating Plasma Science and Plasma Technology. 2017. – V. 172. – P. 364-378.

Подбор параметров расчета фононного спектра твердого молекулярного водорода

Э.А. Халафян¹, А.Е. Обжиров^{1,2}, И.М. Саитов^{2,1}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Под достаточно большими давлениями водород должен образовывать кристаллическую решетку. Предсказывается, что такая фаза водорода является высокотемпературным сверхпроводником [1]. Недавно были предсказаны три новые метастабильные кристаллические структуры [2]. Этой информации достаточно для точного расчета температуры перехода в сверхпроводящее состояние. Для этого необходимо найти фононные спектры данных структур.

В данной работе подбираются параметры расчета фононного спектра метастабильного твердого молекулярного водорода в рамках метода DFPT, реализованного в программном пакете PHONon Quantum Espresso [3]. Используются обменно-корреляционный функционал PBE и псевдопотенциал PAW из программного пакета Quantum-Espresso. Подбираются параметры вычисления динамической матрицы: величина базиса плоских волн и сетка интегрирования в Зоне Бриллюэна. Также подбирается размер сетки, необходимой при интерполяции силовых постоянных для дальнейшего получения закона дисперсии.

Текущая работа показывает, что нельзя полагаться на стандартные значения перечисленных параметров. На основе полученных результатов обсуждается применимость используемого метода для расчета температуры перехода в сверхпроводящее состояние.

Литература

1. Ashcroft N.W. Metallic Hydrogen: A High-Temperature Superconductor? // Phys.Rev.Lett.1968.V. 21, P. 1748.
2. Саитов И.М. Метастабильный проводящий кристаллический водород при высоких давлениях //Письма в ЖЭТФ. 2019. Т.110 № 3, С.184-189.
3. P. Giannozzi, O. Barone, P. Bonfatti, D. Brunato, R. Car, I. Carnimeo, C. Cavazzoni, S. de Gironcoli, P. Delugas, F. Ferrari Ruffino, A. Ferretti, N. Marzari, I. Timrov, A. Urru, S. Baroni, J. Chem. Phys. 152, 154105 (2020)

Полиморфные превращения и плавление льда XVII: молекулярно-динамическое моделирование

А.Т. Барсегян¹, В.В. Стегайлов^{2,1}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Метод расчета свойств воды в твердом и жидком состоянии важен для разных областей науки: биология, физика и тд. В 2017г[1] была получена дегазированная структура Со клатратного гидрата и определена как 17 новая форма твердой воды. С помощью разных молекулярно-динамических методов моделирования можно исследовать сложные системы, которые позволяют описать механизмы на макроскопическом уровне [2]. В данной работе рассматривается задача определения границы устойчивости льда XVII на фазовой диаграмме, а также возможные переходы в другие стабильные фазы воды.

На данный момент известны 46 различных моделей воды, которые с той или иной точностью описывают её разные свойства. Известно, что модель TIP4P/Ice, которая используется в данной работе, с большой точностью описывает разные характеристики твердой фазы воды. В модели вода представляется как твердая неполяризуемая молекула, часть энергии межмолекулярного взаимодействия описывается потенциалом Леннарда Джонса, центрированным на кислороде. Отрицательный заряд расположен на Н-О-Н биссектрисе и имеется 4 сайта взаимодействия.

В 2020г del Rosso и его группа смогли при определенных условиях и методике двумя способами из льда XVII получить чистый кубический лед [2].

В данной работе с помощью методов молекулярной динамики был получен переход льда XVII в кубический лед. Показан механизм такого перехода. Также, методами молекулярной динамики определены разные характеристики льда XVII и сопоставлены с экспериментальными данными.

Литература:

1. Del Rosso L., Celli M., Ulivi L. New porous water ice metastable at atmospheric pressure obtained by emptying a hydrogen-filled ice // Nature Communications. 2016. V. 7. P. 13394.
2. Smirnov G.S., Stegailov V.V. Toward Determination of the New Hydrogen Hydrate Clathrate Structures // J.Phys.Chem. Lett. 2013. V. 4. P. 3560-3564.
3. L. del Rosso M. Celli F. G. e. a. Cubic ice ic without stacking defects obtained from ice xvii // Nature Materials. — 2020. — Access mode: <https://doi.org/10.1038/s41563-020-0606-y>.

УДК 539.3

Применение нейронных сетей для описания физических зависимостей металлов на основе данных молекулярно динамического моделирования

Е.В. Фомин¹, А.Е. Майер¹

¹Челябинский государственный университет

Рассматривается применение глубоких нейронных сетей прямого распространения [1, 2] для описания физических зависимостей: уравнений состояния металлов и сплавов, зависимость энергии границ зерен (ГЗ) от угла разориентировки для симметричных ГЗ наклона в ГЦК металлах.

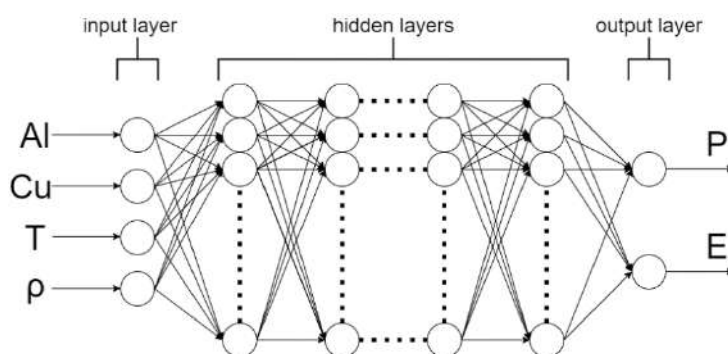


Рис. 1. Нейронная сеть для описания уравнения состояния чистого алюминия и меди, а также твердого раствора атомов меди в алюминиевом кристалле.

Преимущество применения нейронных сетей в качестве уравнений состояния связано с тем, что многие уравнения состояния металлов, используемые в настоящее время, феноменологические (например, уравнения состояния Мю-Грюнейзена [3] и Берча-Мунрагана [4]), то есть нуждаются в подборе некоторых членов основываясь на экспериментальных данных или данных молекулярно динамических (МД) расчетов [5, 6, 7]. С помощью нейронной сети возможно напрямую перенести результаты МД симуляций на более высокие масштабные уровни, не ограничиваясь формой аналитических выражений.

В текущей работе на основе данных МД моделирования всестороннего сжатия и растяжения кристаллов алюминия, меди и твердого раствора атомов меди в алюминиевом кристалле обучается и тестируется нейронная сеть представленная на рис. 1: входные данные – концентрация меди, концентрация алюминия, текущая температура и плотность, на выходе - текущее давление и энергия системы. Все системы содержат 500 000 атомов, каждая из которых построена в программе AT-OMSK [8]. Моделирование проводилось в программном пакете LAMMPS [9], где межатомное взаимодействие определялось ADP потенциалом [10]. Распределение данных для обучения и теста сети показано в таблице 1.

Тип деформации	Тренировочные данные	Тестовые данные

Всестороннее сжатие	100 К, 200 К, 300 К, 400 К,	500 К, 800 К
Всестороннее растяжение	600 К, 700 К, 900 К	500 К, 800 К

Таб.1. Распределение данных молекулярно динамических симуляций для обучения и теста нейронной сети.

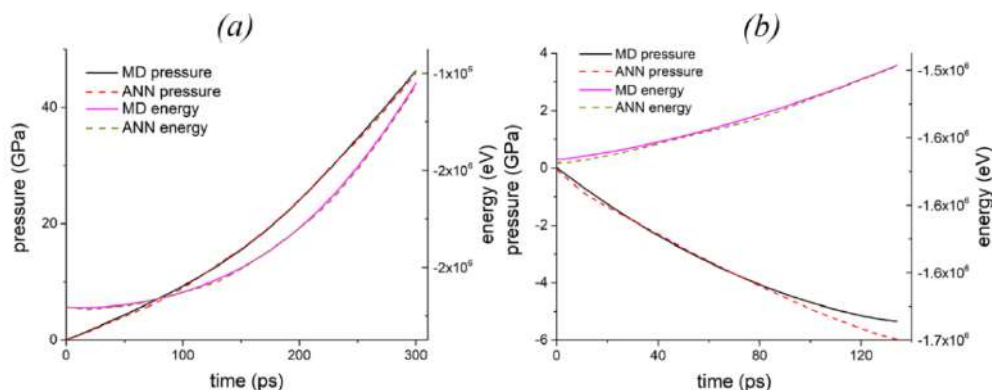


Рис. 2. Сравнение результатов нейронной сети и МД расчетов для тестовых данных: (а) - для всестороннего сжатия при температуре 300 К; (б) – для всестороннего растяжения при температуре 800 К.

Исследование свойств ГЗ также является нетривиальной задачей, так как существует множество конфигураций и характеристик границ [11, 12]. На примере аппроксимации энергии ГЗ наклона в ГЦК кристаллах (рис. 3) представлена возможность расширения использования нейронных сетей на сферу исследований свойств ГЗ. Для обучения и теста данной сети также использовались данные МД симуляций. Работа поддержана Минобрнауки РФ (гос. задание № 075-00250-20-03).

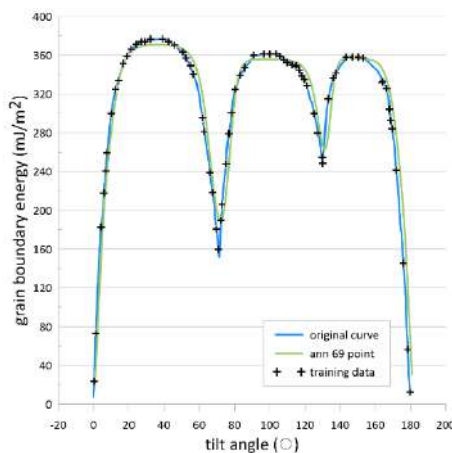


Рис. 3. Аппроксимация зависимости энергии границы зерна от угла разориентировки в чистом алюминии.

Литература

1. Goodfellow I., Bengio Y., Courville A. Deep Learning // MIT Press. 2016. P. 781.
2. Michael A.N. Neural Networks and Deep Learning // Determination Press. 2015.
3. Жарков В.Н., Калинин В.Н. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах / М.: Наука. 1968. 313 с.
4. Birch F. Finite Elastic Strain of Cubic Crystals // Phys. Rev. 1947. V. 71. pp. 809–824.
5. Matar S.F., Alam A.F.AL., Ouaini N. First principles account for large changes in electronic structure and bonding from LaCu to LaCuMg and LaCuMg4 // Comput. Mater. Sci. 2015. V. 97. pp. 231–236.
6. Zhe G., Shinhoo K. A modeling investigation for pseudo-ternary (Ti,Mo,W)(CN) solid-solution: Thermodynamic and elastic properties // Comput. Mater. Sci. 2014. V. 83. pp. 51–56.
7. Jinsong C., Chen W., Chen S., Zhou G., Zhang T., Shock Hugoniot and Mie-Grüneisen EOS of TiAl alloy: A molecular dynamics approach // Comput. Mater. Sci. 2020. V. 174. P. 109495.

8. Hirel P. AtomsK: A tool for manipulating and converting atomic data files // Comput. Phys. Comm. 2015. V. 197. pp. 212-219.
9. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. pp. 1–19.
10. Apostol F., Mishin Y. Interatomic potential for the Al-Cu system // Phys. Rev. B 2011. V. 0.83. P. 054116.
11. Olmsted D.L., Foiles S.M., Holm E.A. Survey of computed grain boundary properties in face-centered cubic metals: I. Grain boundary energy // Acta Mater. 2009. V. 57. pp. 3694-3703.
12. Patala S. Understanding grain boundaries – The role of crystallography, structural descriptors and machine learning // Comput. Mater. Sci. 2019. V. 162. pp. 281-294.

УДК 538.9

Применимость стандартных приближений в расчетах динамических свойств твёрдого водорода

А. Е. Обжиров^{1,2}, И.М. Саитов^{2,1}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Поскольку водород является легчайшим элементом, его кристаллическая фаза обладает особыми динамическими свойствами. Предполагается, что благодаря этому металлический водород метастабильна и обладает высокой температурой перехода в сверхпроводящее состояние, которая, возможно, близка к комнатной температуре. Экспериментальное изучение металлического водорода сталкивается с многочисленными трудностями, большинство сведений установлены в теоретических работах. Исследования металлического водорода продолжаются, и недавно были найдены новые фазы, стабильные при температуре 100 K [1].

Теория DFPT и метод конечных смещений являются наиболее распространенными методами расчета динамических свойств твердых тел. Они выведены в гармоническом приближении при нулевой температуре. Поскольку кристаллические структуры новых фаз металлического водорода стабильны при температуре 100 K, результаты расчетов, в которых учитываются ангармонические и температурные эффекты, могут значительно отличаться от результатов расчетов в гармоническом приближении при нулевой температуре. В данной работе рассмотрены способы учета этих эффектов и продемонстрирована важность соответствующих поправок для корректного описания динамических свойств новых фаз.

Сравниваются результаты двух серий расчетов динамических свойств. В первой серии расчетов силовые постоянные определяются в гармоническом приближении при температуре 0 K и давлении 400 ГПа методом конечных смещений. Силы Геллмана-Фейнмана рассчитываются в рамках теории функционала плотности в программном пакете VASP [2-5] и обрабатываются в программном пакете Phonopy [6]. Обсуждается роль главных приближений, используемых в расчетах: псевдопотенциала, обменно-корреляционного функционала, расчетной ячейки.

Во второй серии при расчетах динамических свойств учитываются ангармонические и температурные эффекты. Соответствующие поправки выведены в модели [7], которая использует автокорреляционные функции скорости и силовые постоянные, полученные в гармоническом приближении. Автокорреляционные функции скорости рассчитываются при помощи молекулярной динамики. Молекулярная динамика осуществляется в программном пакете VASP [2-5]. Для осуществления расчетов в рамках модели [7] применяется программный пакет DynaPhoPy [8].

Текущие расчеты показывают, что гармоническое приближение неправильно описывает динамические свойства новых фаз металлического водорода. Это объясняется тем, что новые фазы были обнаружены при помощи молекулярной динамики, в которой учитываются ангармонические и температурные эффекты. Данные поправки приводят к стабилизации кристаллических структур новых фаз. Таким образом, при исследованиях кристаллического водорода, стабильного при ненулевой температуре, необходимо выходить за рамки гармонического приближения.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ № 18-19-00734.

Литература

1. Саитов И.М., Метастабильный проводящий кристаллический водород при высоких давлениях // Письма в ЖЭТФ, 110, 184, 2019

2. Kresse G., Hafner J., Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B, 47, 558, 1993
3. Kresse G., Hafner J., Ab initio molecular-dynamics simulation of the liquid-metal-amorphous-semiconductor transition in germanium // Phys. Rev. B, 49, 14251, 1994
4. Kresse G., Furthmüller J., Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // Comput. Mat. Sci., 6, 15, 1996
5. Kresse G., Furthmüller J., Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B, 54, 11169, 1996
6. Togo A., Tanaka I., First principles phonon calculations in materials science // Scr. Mater., 108, 1, 2015
7. Zhang D.B., Sun T., Wentzcovitch R.M., Phonon Quasiparticles and Anharmonic Free Energy in Complex Systems // Phys. Rev. Lett., 112, 058501, 2014
8. Carreras A., Togo A., Tanaka I., Dynaphopy: A code for extracting phonon quasiparticles from molecular dynamics simulations // Comput. Phys. Comm., 221, 221, 2017

УДК 539

Расчет упругих свойств аморфного льда

А.А. Гаркуль¹, В.В. Стегайлов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

В отличие от обычных фазовых переходов первого рода, кинетика переходов кристалл-аморфная форма и аморфная-аморфная форма изучена гораздо меньше. Предполагается, что неустойчивость решетки является механизмом, который запускает твердотельную аморфизацию. Мягкие моды совместных колебаний могут отвечать за изменение координации в аморфных фазах льда.

Для микроскопического понимания того, как проходят подобные превращения в кристаллических и аморфных льдах, эффективным теоретическим инструментом является метод молекулярной динамики (МД).

В данной работе рассмотрены МД модели кристаллического и аморфного льда и проведен расчет их упругих свойств и скоростей звука.

Моделирование системы и расчеты реализованы с использованием пакета LAMMPS.

Литература

1. E. L. Gromnitskaya, O. V. Stal'gorova, V. V. Brazhkin, A. G. Lyapin. Ultrasonic study of the nonequilibrium pressure-temperature diagram of H₂O ice // Phys. Rev. B 64, 094205 (2001)

УДК 544.034

Транспортные процессы в водных растворах сахарозы

В.И. Дещеня

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Объединённый институт высоких температур РАН

Углеводы широко распространены в природе, особенно в растительном мире, и составляют основную массу органического вещества планеты. В то же время они имеют и большое промышленное значение. Они используются для производства таких материалов, как пластмассы, искусственные волокна, строительные материалы и многих других. Одними из определяющих характеристик являются транспортные свойства: диффузия и вязкость. Несмотря на большое количество экспериментальных данных, теоретических работ с попыткой описания свойств углеводов недостаточно. Это приводит к целесообразности проверки моделей сахаров на качество воспроизводимости ими экспериментальных данных. Модели, хорошо повторяющие экспериментальные данные для группы углеводов, могут описывать и те сахара, для которых проведение эксперимента затруднительно.

Для описания молекулярных связей в молекуле сахарозы использовалось силовое поле OPLS-AA[1-4], для воды использовалась модель TIP4P/2005[5]. Она включает фиктивный заряжен-

ный атом, расположенный рядом с кислородом вдоль биссектрисы угла НОН, позволяющий воспроизвести более точное электростатическое распределение вокруг молекулы. Для обработки электростатического взаимодействия использовался метод частица-частица/частица-сетка (PPPM). Молекулярно-динамическая ячейка включала 4 молекулы сахарозы и 685 молекул воды, что обеспечивает 10% массовую долю сахарозы в растворе. Во избежание поверхностных эффектов использовались периодические граничные условия. Для начального размещения молекул в ячейке использовалась программа Packmol[7]. Моделирование проводилось с помощью программного пакета LAMMPS.

В диапазоне температур от 273К до 343К выполнен расчет транспортных коэффициентов раствора - вязкости и диффузии. Коэффициент вязкости определялся методом Грина-Кубо, коэффициент диффузии – с помощью формулы Эйнштейна-Смолуховского. Система приводилась в равновесие в изобарическом-изотермическом NPT ансамбле, в котором происходил расчет плотности раствора при заданной температуре и атмосферном давлении. Использовался термостат и баростат Нозе-Гувера. Расчет коэффициентов происходил в каноническом NVT ансамбле при полученной плотности.

Произведено сравнение с экспериментальными значениями. В табл. 1 представлены результаты расчета величин η_0 и энергии активации E_a , полученные путем аппроксимации полученных значений вязкости функцией $\eta = \eta_0 \exp(E_a / (RT))$. Результаты расчета коэффициентов диффузии для системы с 4 и 32 молекулами сахарозы с 10% массовой долей углевода в растворе приведены на рис. 1. Так же приведена кривая, полученная путем аппроксимации экспериментальных данных уравнением Фогеля-Фульчера-Таммана(VFT) $D = D_0 \exp(CT_0/(T - T_0))$ [8]. Получено хорошее согласие моделирования с экспериментом. Исходя из этого, используемую модель можно рассматривать как перспективную для описания сахаров, в том числе с неизвестными свойствами.

	η_0 , мПа с	E_a , Дж/моль
МД	1.56 ± 0.03	16310 ± 40
Эксперимент [4]	1.45 ± 0.02	16430 ± 30

Таб.1. Значения η_0 и энергии активации E_a

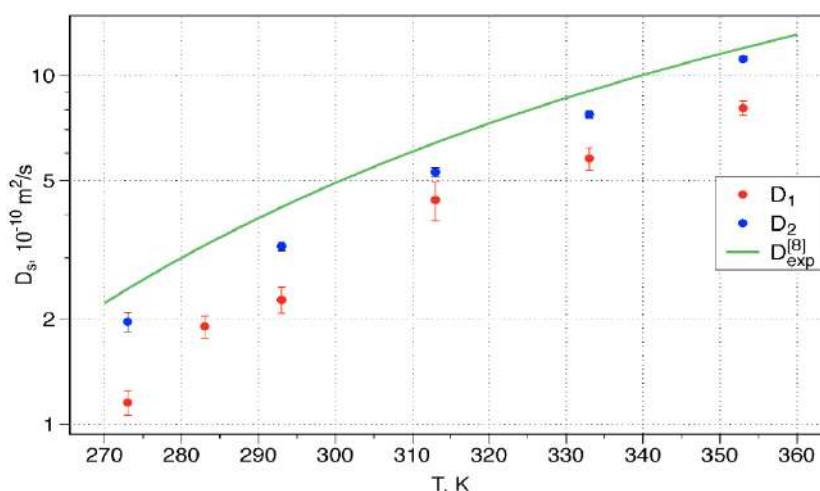


Рис. 1. Результаты расчета диффузии раствора сахарозы (красные точки - 4 молекулы сахарозы, синие - 32) и экспериментальная кривая (зеленая линия)

Расчёты проведены на суперкомпьютерах "Десмос" и "Фишер" ОИВТ РАН. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда по гранту №18-19-00734. Автор выражает благодарность Норману Г.Э. и Ланкину А.В. за постановку задач и содействие во время работы, а также Кондратьюку Н.Д. за продуктивные обсуждения.

Литература

1. *Jorgensen W. L., Maxwell D. S., Tirado-Rives J.* Development and Testing of the OPLS All-Atom Force Field on Conformational Energetics and Properties of Organic Liquids. // *Journal of the American Chemical Society*. 1996. V. 118, No. 45. P. 11225–11236.
2. *Jorgensen W.L., Tirado-Rives J.* Potential energy functions for atomic-level simulations of water and organic and biomolecular systems // *PNAS* 2005 V. 102, N.19 P.6665-6670
3. *Dodda L.S., Vilseck J.Z., Tirado-Rives J., Jorgensen W.L.* 1.14* CM1A-LBCC: localized bond-charge corrected CM1A charges for condensed-phase simulations // *J. Phys. Chem.* 2017. V. 121, N. 15 P. 3864-3870
4. *Dodda L.S., Cabeza de Vaca I., Tirado-Rives J., Jorgensen W.L.* LigParGen web server: an automatic OPLS-AA parameter generator for organic ligands // *Nucleic Acids Res.* 2017. V. 45, N.W1 P. W331-W336
5. *Abascal J. L. F., Vega C.* A general purpose model for the condensed phases of water: TIP4P/2005. // *The Journal of Chemical Physics*. 2005. V. 123, No. 23. P. 234505
6. *Martínez L., et al.* Packmol: A Package for Building Initial Configurations for Molecular Dynamics Simulations // *J. Comput. Chem.* 2009. V. 30, No 13. P. 2157–2164.
7. *Telis V. R. N., Telis-Romero J., Mazzotti H. B., Gabas, A. L.* Viscosity of Aqueous Carbohydrate Solutions at Different Temperatures and Concentrations // *International Journal of Food Properties*. 2007. V. 10, No. 1. P. 185–195.
8. *Rampp, M., Buttersack, C., & Lüdemann, H.-D.* c,T-Dependence of the viscosity and the self-diffusion coefficients in some aqueous carbohydrate solutions // *Carbohydrate Research*, 2000. V. 328. P. 561–572.

Секция электродинамики сложных систем и нанофотоники

Председатель: А.Н. Лагарьков (д.ф.-м.н., акад. РАН)
Зам. председателя: А.П. Виноградов (д.ф.-м.н., профессор)
Секретарь: В.И. Полозов

Дата: 24.11.2020 Время: 10:00

УДК 530.182, 535-45, 537.862, 537.872.32

Анализ пространственного распределения плотности мощности поля второй гармоника, генерируемого от линейной структуры из диэлектрических цилиндрических частиц большой высоты

А.И. Толкачёв, А.А. Шамына, В.Н. Капшаев

Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины

Генерация второй гармоника (ГВГ) является одним из немногих методов исследования поверхностей диэлектрических наночастиц. В данной работе мы анализируем сигнал, генерируемый от боковых поверхностей высоких диэлектрических цилиндров, покрытых оптически нелинейным веществом и составленных в линейную структуру (рис. 1, а). Рассматриваемая структура является подобием упорядоченных нанотрубок.

В работе [1] получено аналитическое выражение для вектора электрической напряженности электромагнитного излучения удвоенной частоты, генерируемого от боковой поверхности цилиндра, и приведена предельная форма решения при больших значениях высоты частицы. Также показано, что при нормальном падении плоской электромагнитной волны на боковую поверхность, излучение генерируется преимущественно в плоскости, перпендикулярной оси цилиндра. Поэтому генерация происходит только в плоскости Oxy .

При расчете ГВГ от структуры из высоких цилиндров воспользуемся принципом суперпозиции полей с учетом сдвига фаз. Тензор диэлектрической восприимчивости нелинейного вещества можно представить в виде

$$\chi_{ijk}^{(2)} = \chi_1^{(2)} n_i n_j n_k + \chi_2^{(2)} n_i \delta_{jk} + \chi_3^{(2)} (n_j \delta_{ik} + n_k \delta_{ij}) + \chi_4^{(2)} n_m (n_k \varepsilon_{ijm} + n_j \varepsilon_{ikm}), \quad i, j, k = x, y, z, \quad (1)$$

где n_i – компоненты вектора нормали $\mathbf{n}$ к поверхности, δ_{ij} – дельта-символ Кронекера, ε_{ijk} – символ Леви-Чивита. В дальнейшем под типом анизотропии $\chi_i^{(2)}$ подразумеваются значения независимых компонент тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$ $\chi_i^{(2)} = 1, \chi_j^{(2)}|_{j \neq i} = 0$.

Рассмотрим падение плоско поляризованной волны (с плоскостью поляризации Oxy и направлением вдоль оси Ox) на такую структуру из N цилиндров с радиусами оснований a ($k_0 a = 0.1$) и расстояниями между их осями d ($k_0 d = 5$) (рис. 1, а). Нормированные графики распределения генерируемого излучения для типов анизотропии $\chi_{1-4}^{(2)}$ и различного количества цилиндров в структуре представлено на рис. 1, б-д. Как видим, при увеличении количества цилиндров излучение характеризуется более узкими лепестками диаграммы направленности, а их количество возрастает. Отметим симметричность распределения излучения относительно оси Ox для всех типов анизотропии. Это обусловлено симметрией схемы поставленной задачи.

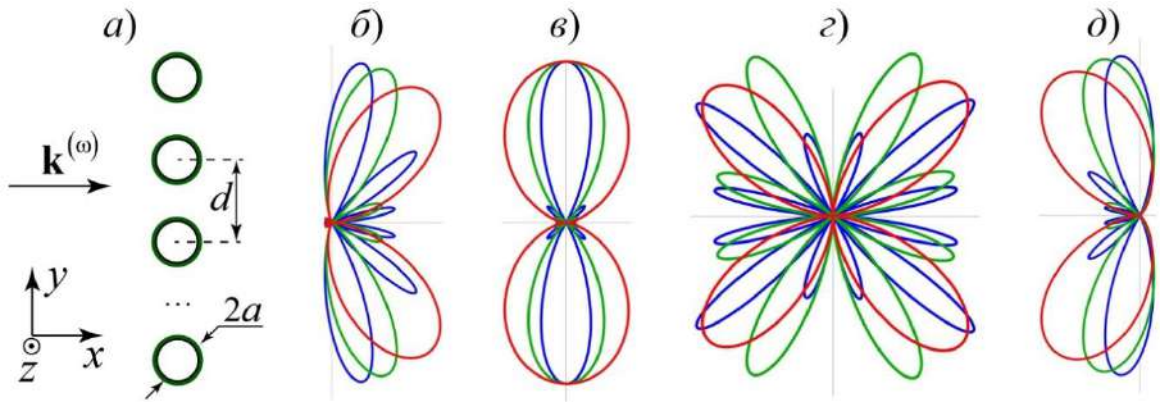


Рис. 1. Схема задачи о ГВГ от линейной структуры из цилиндрических частиц (а) и распределение генерируемого излучения для типов анизотропии: (б) $\chi_1^{(2)}$, (в) $\chi_2^{(2)}$, (г) $\chi_3^{(2)}$, (д) $\chi_4^{(2)}$. Красному цвету соответствует число цилиндров в структуре $N = 1$, зеленому – $N = 2$, синему – $N = 3$.

Исследуем влияние количества цилиндров N , а также расстояния между их осями d на генерируемую мощность. На рис. 2 приведены графики зависимости отношения максимальной по направлению наблюдения плотности мощности S для структуры из N цилиндров (S_N) к аналогичной величине для одного цилиндра (S_1) от расстояния d . Для всех типов анизотропии на каждом из представленных графиков можно отметить ряд ярко выраженных минимумов и максимумов, обусловленных интерференцией волн, генерируемых от каждого из цилиндров, так как положения глобальных максимумов ($k_0 d$) для отдельного типа анизотропии одинаковы для структур с различным N . Различие указанных положений для отдельных типов анизотропии связано с тем, что направления наблюдения максимальной плотности мощности S для отдельных типов анизотропии отличаются (что видно из различных направлений лепестков распределения плотности мощности на рис. 1, б-д). Отметим, что значения глобальных максимумов плотности мощности S_N оказываются равными $N^2 S_1$.

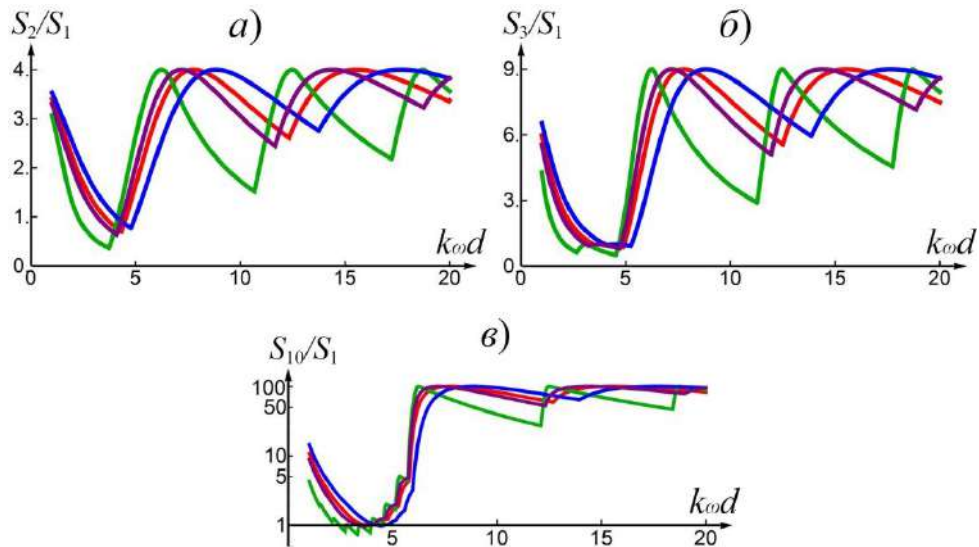


Рис. 2. Зависимость отношения максимальной по направлению наблюдения плотности мощности для N цилиндров к аналогичной величине для одного цилиндра.

Количество цилиндров в структуре: (а) $N = 2$, (б) $N = 3$, (в) $N = 10$. Красному цвету соответствует тип анизотропии $\chi_1^{(2)}$, зеленому – $\chi_2^{(2)}$, синему – $\chi_3^{(2)}$, фиолетовому – $\chi_4^{(2)}$.

В данной работе рассмотрена задача о ГВГ от боковых поверхностей высоких диэлектрических цилиндров, составленных в линейную структуру. Графический анализ распределения генерируемого поля показал, что увеличение количества цилиндров в структуре приводит к возрастанию количества лепестков на диаграмме направленности и их сужению. Анализируя зависимость максимальной по направлению наблюдения плотности мощности S от расстояния между центрами цилиндров d , было обнаружено, что для каждого типа анизотропии существуют свои оптимальные расстояния d , при которых наблюдается максимум S . Причем увеличение количества цилиндров в

структуре не влияет на численные значения величин d для отдельного типа анизотропии. Плотность генерируемой мощности пропорциональна квадрату числа элементов в структуре, что свойственно явлениям интерференции и дифракции.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта БРФФИ (проект Ф20М–011).

Литература

1. Шамына А.А., Капшай В.Н. Генерация второй гармоники от тонкого цилиндрического слоя. I. Аналитическое решение // Оптика и спектроскопия. – 2019. – Т. 126, № 6. – С. 724–731.

УДК 535-15

Влияние природы парамагнитного металла-комплексообразователя на спектральные свойства фталоцианинов сэндвичевого строения

Т.В. Дубинина^{1,2}, М.М. Иванова¹, М.С. Белоусов¹, А.Д. Косов¹, С.С. Маклаков³

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

²Институт физиологически активных веществ РАН

³Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Объекты настоящего исследования – фталоцианиновые красители, представляют собой макроциклические органические соединения с протяженной системой π -электронного сопряжения. Наличие протяженной π -системы обуславливает яркую окраску данных веществ (синяя или зелёная) и высокие значения коэффициентов экстинкции ($\lg \varepsilon \geq 10^5$). Молекулы фталоцианиновых комплексов сэндвичевого типа (дифталоцианины и динафталоцианины) устроены по аналогии с молекулой ферроцена, где роль железа выполняют ионы редкоземельных элементов (РЗЭ). Комплексы с ионами РЗЭ в степени окисления 3+ представляют собой органические π -радикалы.

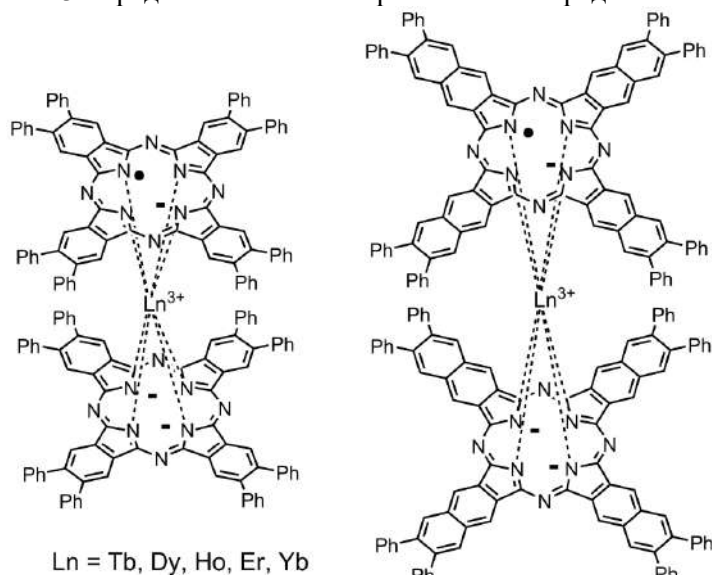


Рис.1. Структура дифталоцианинов (слева) и динафталоцианинов (справа) сэндвичевого строения

Спектры поглощения фталоцианиновых комплексов очень характерны. Наиболее интенсивная полоса поглощения (Q полоса) расположена в интервале 600 нм (фталоцианины) – 800 нм (нафталоцианины) и отвечает переходу с высшей занятой молекулярной орбитали (ВЗМО) на низшую свободную (НСМО). В УФ области расположена ещё одна интенсивная полоса поглощения – B полоса, соответствующая переходу электрона с ВЗМО-1 на НСМО. В случае комплексов сэндвичевого типа менее интенсивные полосы поглощения, связанные с переходами свободного радикала находятся как в видимой области (BV полоса), так и в ближней ИК области (RV и IV полосы поглощения). Последние особенно чувствительны к природе центрального лантанид-иона. С увеличением ионного радиуса лантанида и соответственно уменьшением внутримолекулярных взаимодействий происходит bathochromic смещение IV полосы и гипсохромное смещение RV полосы. Для фенил-замещенных дифталоцианинов, представленных на рис.1 RV полоса поглощения находится при 1071-1082 нм, а IV полоса поглощения (или полоса переноса заряда) при 1619-1647 нм.

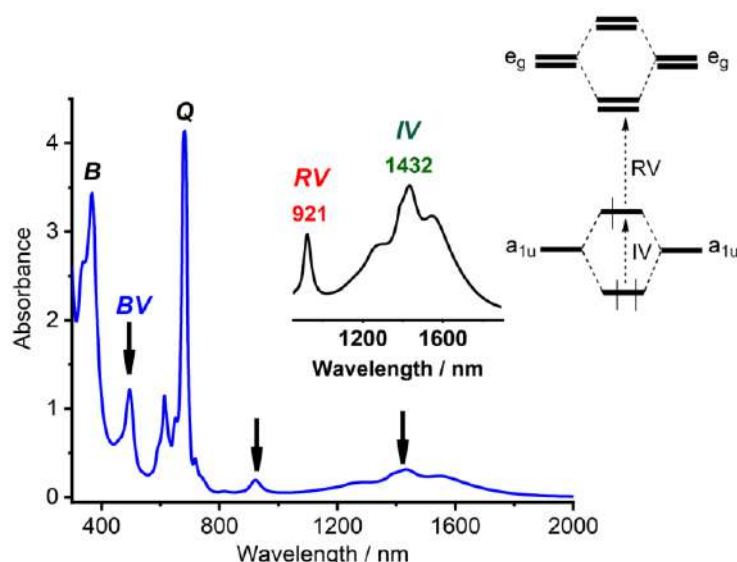


Рис.2. Электронный спектр поглощения дифталоцианинового комплекса тербия с периферическими фенильными группами.

Наличие парамагнитного лантанид иона сказывается на спектрах ядерного магнитного резонанса и электронного парамагнитного резонанса комплексов. Так в ^1H ЯМР спектрах анионной формы (не содержащей органический π -радикал) сэндвичевых соединений ароматические протоны тербиевого комплекса смещены в сильное поле примерно до -100 м.д. Для комплексов эрбия напротив характерно смещение сигналов в слабое поле до 40 м.д.

В случае спектров электронного парамагнитного резонанса за счёт взаимодействия π -радикалов и f -электронов возможно исчезновение сигнала органического радикала с g фактором около 2 или усложнение характера спектра [1].

Интересно отметить, что наличие протяженной π -системы у фталоцианинов обуславливает стеккинговые взаимодействия, которые в тонких плёнках проявляются в виде образования агрегатов-гранул с диаметром 100-200 нм [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта президента МК-1056.2020.3.

Литература

1. Dubinina T., Kosov A., Petrusevich E., Borisova N., Trigub A., Mamin G., Gilmudinov I., Masitov A., Tokarev S., Pushkarev V., Tomilova L. Sandwich double-decker Er(III) and Yb(III) complexes containing naphthalocyanine moiety: synthesis and investigation of the effect of a paramagnetic metal center. // *Dalton Transactions*, 2019, V. 48, p.13413–13422.
2. Dubinina T., Belousov M., Maklakov S., Chernichkin V., Sedova M., Tafeenko V., Borisova N., Tomilova L. Phenyl-substituted terbium(III) single- and multiple-decker phthalocyaninates: Synthesis, physicochemical properties and peculiarities of self-assembly in solid phase. // *Dyes and Pigments* 2019. V. 170. 107655.

УДК 533.922

Дисперсионные свойства трехмерного проволочного метаматериала, состоящего из двух независимых металлических сеток

Д.И. Сахно¹, Е.А. Корешин¹, П.А. Белов¹

¹Национальный исследовательский университет ИТМО

Проволочные метаматериалы представляют собой большой класс периодических структур (искусственных сред), составленных из металлических проводов с различными связями [1]. В настоящее время проволочные метаматериалы находят широкий спектр применений – от получения изображений с субволновым разрешением до локализации радиочастотного магнитного поля в магнитно-резонансной томографии (МРТ) [1].

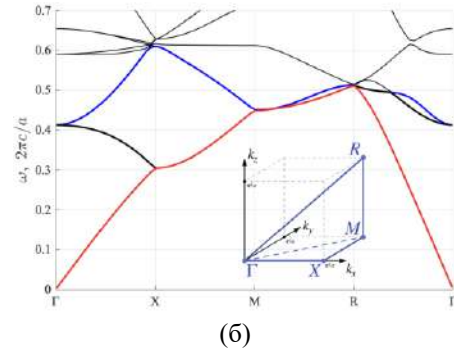
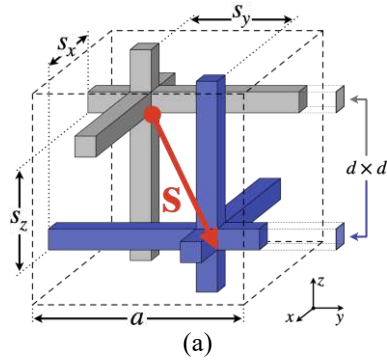


Рис.1 (а) Элементарная ячейка трехмерного проволочного метаматериала, состоящего из двух независимых металлических сеток с указанием всех размеров и вектора относительного сдвига решеток s . (б) Дисперсионная диаграмма для волн распространяющихся в структуре при $s = (0.5, 0.5, 0.5)a$.

Проволочные метаматериалы изучались очень интенсивно, но эти структуры до сих пор полны сюрпризов. Так, например, в одиночной трехмерной металлической решетке [4] волны могут распространяться, начиная с некоторой ненулевой частоты, называемой плазменной. Если же рассматривать пару таких сеток, помещенных друг в друга и смещенных в пространстве (interlaced wire metamaterial [3], Рис.1а), то метаматериал начинает поддерживать распространение волн на всех частотах (см. Рис.1б). Эта особенность была отмечена в работах [2, 3]. В данной работе мы впервые рассматриваем конфигурацию такого метаматериала из идентичных сеток, а так же допускаем возможность их относительного сдвига.

Собственные моды трехмерного проволочного метаматериала на основе двух решеток были рассчитаны в пакете численного моделирования электродинамических задач CST MWS. Элементарная ячейка состоит из пары одиночных сеток (Рис.1а: $a=1\text{cm}$, $d=0.05a$), смещенных на вектор s относительно друг друга. Дисперсионная диаграмма (Рис.1б) показывает, что среда поддерживает распространение электромагнитных волн в низкочастотном диапазоне [3, 4].

Изочастотные контуры для трехмерного проволочного метаматериала состоящего из двух одинаковых решеток, сдвинутых на полпериода во всех направлениях относительно друг друга, рассчитанные для кубической элементарной ячейки (Рис.1а), представлены на Рис.2а (на контурах указаны частоты в нормированных единицах c/a). Несложно заметить, что результаты данного расчета неверны: изочастотные контуры должны пересекаться с границами зоны Бриллюэна под прямым углом и не должны иметь пересечений друг с другом, так как групповая скорость волны ($V_g = d\omega/dk$) есть непрерывная и гладкая функция. Разбиение симметрии путем относительного сдвига подрешеток в положение приводит к правильной изочастотной картине на Рис.2б.

Было выдвинуто предположение, что элементарная ячейка является не просто кубической, а объемо-центрированной кубической: ячейка Вигнера-Зейца представлена ромбоэдром (Рис.2в), объем которого вдвое меньше изначальной кубической элементарной ячейки, а отношение их зон Бриллюэна показано на Рис. 2в. Пересчет изочастотных контуров (дисперсионных диаграмм) для новой ячейки (Рис.2г) приводит к непривычной изочастотной проекции: контуры возникают в углах зоны, т.е. на низких частотах для данного метаматериала характерны большие волновые векторы.

Отсутствие изочастотной поверхности вокруг Γ -точки можно доказать, применяя теорему Блоха к разности независимых квазистатических потенциалов решеток в низкочастотном пределе [4] и решая получившуюся систему уравнений:

$$\begin{cases} (\varphi_1 - \varphi_2) = (\varphi_2 - \varphi_1) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} \\ (\varphi_1 - \varphi_2) = (\varphi_2 - \varphi_1) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} \\ (\varphi_1 - \varphi_2) = (\varphi_2 - \varphi_1) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3} \end{cases} \quad \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_2 - n_3 \\ n_1 + n_3 + 1 \\ n_2 - n_1 \end{pmatrix} \frac{2\pi}{a}, \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbf{Z} \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{a}_i$ – векторы прямой решетки для ромбоэдрической ячейки.

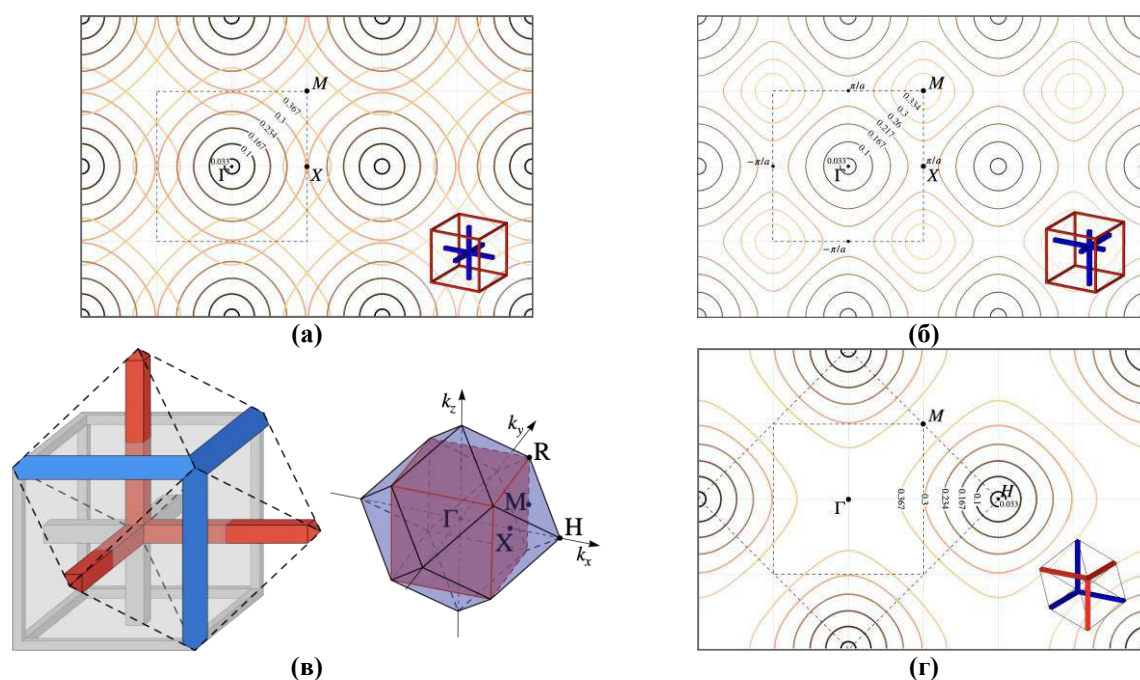


Рис.2 (а) Изочастотные контуры (частоты нормированы на c/a) для трехмерного проволочного метаматериала на основе двух сеток при векторе сдвига $\mathbf{s} = (0.5, 0.5, 0.5)\mathbf{a}$, посчитанные для кубической элементарной ячейки. (б) Изочастотные контуры для метаматериала с вектором сдвига $\mathbf{s} = (0.2, 0.2, 0.2)\mathbf{a}$ (в) Найденная ромбоэдрическая эл. ячейка для метаматериала с вектором сдвига $\mathbf{s} = (0.5, 0.5, 0.5)\mathbf{a}$; изображение зон Бриллюэна обеих ячеек: кубической (красный куб) и ромбоэдрической (синий многогранник). (г) Пересчитанные изочастотные контуры при векторе сдвига $\mathbf{s} = (0.5, 0.5, 0.5)\mathbf{a}$.

Таким образом для, казалось бы, изотропного материала (Рис.1а) мы получили уникальный эффект рождения изочастотных контуров в углах зоны Бриллюэна, что потенциально позволяет говорить о создании высококонтрастного диэлектрика на базе рассмотренного метаматериала.

Литература

1. Constantin R. Simovski, Pavel A. Belov, Alexander V. Atrashchenko and Yuri S. Kivshar, "Wire Metamaterials: Physics and Applications," *Advanced Materials*, vol. 24, p. 4229-4248, 2012.
2. Jonghwa Shin, Jung-Tsung Shen, and Shanhui Fan "Three-dimensional electromagnetic metamaterials that homogenize to uniform non-Maxwellian media", *Physical Review B*, vol. 76, 113101, 2007.
3. Hafssaa Latioui and Mário G. Silveirinha, "Light tunneling anomaly in interlaced metallic wire meshes", *Physical Review B*, vol. 96, 195132, 2017.
4. Wen-Jie Chen, Bo Hou, Zhao-Qing Zhang, John B. Pendry & C. T. Chan, "Metamaterials with index ellipsoids at arbitrary k-points," *Nature Communications*, vol. 9, 2086, 2018.

УДК 537.877

Модель для описания аномально высокого коэффициента усиления в нанопластинках коллоидных квантовых точек

Е.А. Терещенков^{1,2,3}, А.А. Зябловский^{1,2,3}, Е.С. Андрианов^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

³ВНИИА им. Духова

В работе [1] описывается эксперимент, в котором изучается излучение слоев квантовых точек. В ходе эксперимента выяснялось, что с увеличением толщины образца (количества слоев квантовых точек), интенсивность излучения не возрастает, а коэффициент усиления максимален для небольшого числа слоев. Также с ростом интенсивности накачки происходит смещение той частоты, на которой наблюдается максимум интенсивности излучения.

Для объяснения этих явлений используется полуклассическое описание распространения света в усиливающей среде. Наличие большого числа фотонов позволяет пренебречь квантовыми флуктуациями и описывать электромагнитное поле классическими уравнениями Максвелла, в то время как динамика дипольных моментов и инверсной заселенности квантовых точек требует квантово-механического рассмотрения. Система уравнений для описания электрического поля E , поляризации P и инверсии населённости n квантовых точек имеет вид [2]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \frac{\varepsilon_0(z)}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} &= \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} \\ \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + \frac{2}{\tau_p} \frac{\partial P}{\partial t} + \omega_0^2 P &= -\frac{2\omega_0 |\mu|^2 n E}{\hbar} \\ \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{\tau_n} (n - n_0) &= \frac{2}{\hbar \omega_0} E \frac{\partial P}{\partial t}\end{aligned}$$

Здесь $\varepsilon_0(z)$ – диэлектрическая проницаемость среды, в которой находятся квантовые точки, ω_0 – частота перехода квантовых точек, τ_p, τ_n – времена релаксации поляризации и инверсии, соответственно, μ – матричный элемент дипольного перехода в квантовых точках.

Переходя к представлению Фурье и исключая в адиабатическом приближении переменные n и P , систему уравнений Максвелла-Блоха можно свести к уравнению:

$$\frac{\partial^2 E(z, \omega)}{\partial z^2} + \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \varepsilon_{gain}(z, \omega) E(z, \omega) = 0,$$

где

$$\varepsilon_{gain}(z, \omega) = \varepsilon_0 + \alpha \frac{\omega_0}{\omega} \frac{-i + (\omega^2 - \omega_0^2) / (2\omega / \tau_p)}{1 + \beta |E|^2 + [(\omega^2 - \omega_0^2) / (2\omega / \tau_p)]^2},$$

$$\alpha = 4\pi |\mu|^2 \tau_p n_0 / \hbar, \quad \beta = |\mu|^2 \tau_p \tau_n / \hbar^2 \quad - \text{константы.}$$

Теперь усиливающая среда описывается эффективной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_{gain}(z, \omega)$, которая зависит от амплитуды электрического поля $|E|$ и частоты ω . Как следствие, возникает зависимость между интенсивностью накачки и частотой, на которой наблюдается максимум излучения.

Исследована зависимость коэффициента усиления от толщины образца, проведено сравнение с экспериментом.

Литература

1. Guzelturk B., Pelton M., Olutas M., Demir H.V. Giant Modal Gain Coefficients in Colloidal II-VI Nanoplatelets.// Nano Lett. 2019, 19, 277-282.
2. Дорофеев А.В., Зябловский А.А., Пухов А.А., Лисянский А.А., Виноградов А.П. Прохождение света через композитные материалы, содержащие усиливающие слои.// УФН 2012. Т. 182. №11.

УДК 537.874.2

Ошибки, возникающие из-за краевых эффектов при измерении характеристик рассеяния в бистатистических измерениях

Р.В. Гильмутдинов¹, Н.Л. Меньших^{1,2}, С.А. Федоров^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

При проведении бистатистических измерений характеристик рассеяния материалов возникает множество трудностей, не позволяющих получить высокую точность результатов. В частности, существует значительная погрешность измерения, связанная с конечностью размеров исследуемых

образцов материалов. Например, общеизвестно, что ЭПР объекта в моностатических измерениях для квадратного образца зависит от ориентации ребер квадрата относительно поляризации падающей волны [1].

В работе исследуется влияние геометрии плоского образца на значение модуля коэффициента отражения (МКО). Отражения от образцов в зеркальном направлении, полученные путем численного моделирования для различных геометрий, сравнивались между собой. Было проведено сравнение с аналитическими расчетами по формулам Френеля [2] для плоского бесконечного слоя материала, расположенного на проводящей подложке.

Исследование рассеивающих свойств материала в зависимости от частоты и угла падения проводилось методом моментов. Были созданы компьютерные модели в программе FEKO для следующих геометрий: квадратной пластины с размером ребра 10 см, с двумя положениями ребер относительно вектора **E** падающей волны, прямоугольной пластины размером 10x20 см, и шестиугольника. Обозначим диагональным расположением образца случай, когда стороны квадрата образуют угол 45° с вектором **E**, а параллельным расположением случай, когда вектор **E** параллелен двум сторонам квадрата. Длинная сторона прямоугольной пластины параллельна вектору **E**. Шестиугольная пластина представляет собой квадрат со стороной 10 см, к двум сторонам которого присоединены равнобедренные треугольники. Каждый образец представляет собой слой диэлектрика с материальными параметрами не зависящими от частоты: диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = 5 + i5$ и магнитной проницаемостью $\mu = 1$, толщиной 10 мм, находящийся на подложке из идеального проводника толщиной 2 мм.

На исследуемый объект падает плоская линейно-поляризованная волна. Для каждого угла падения волны рассчитывается поле, зеркально отраженное от объекта. Помимо исследуемого образца объектом является калибровочная металлическая пластина такого же размера для нормировки полученного сигнала. Численное моделирование характеристик рассеяния проводилось в диапазоне частот 3-12 ГГц с шагом 500 МГц и при углах падения и отражения в диапазоне $0-80^\circ$ от нормали с шагом 1° .

На рисунке 1 представлены графики зависимости МКО от угла падения при частоте 6 ГГц для различных геометрий образца. Результаты расчётов на рисунке 1а для двух геометрий квадратного образца согласуются между собой, аналогично кривые МКО для шестиугольника и прямоугольника находятся в соответствии с друг с другом. Все рассчитанные кривые для коэффициента отражения повторяют аналитическую кривую, но проходят несколько ниже нее. При этом угол Брюстера у кривых МКО на рисунке 1а для крупных пластин лежит ближе к его аналитическому положению, а пик глубже.

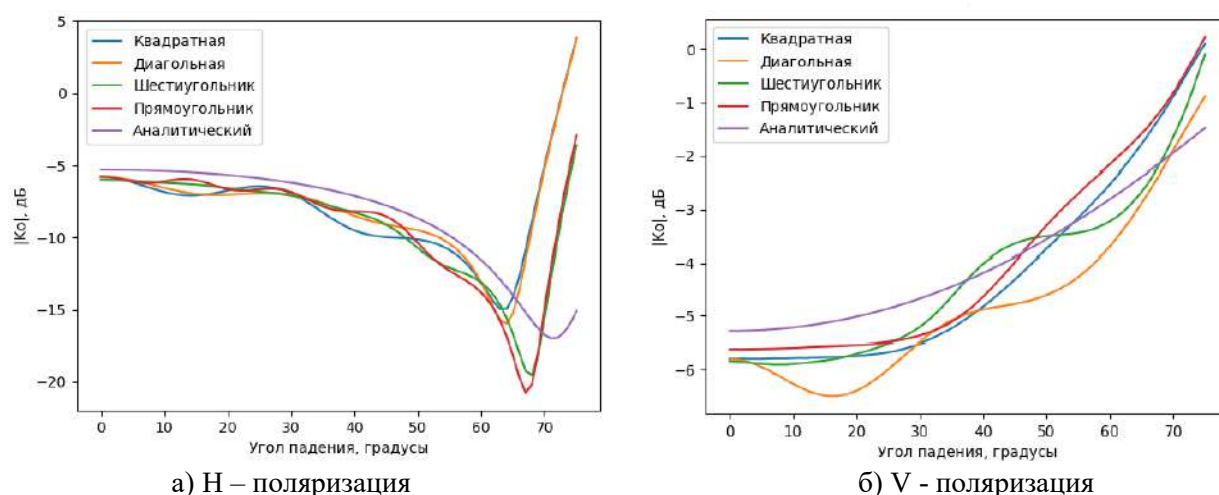


Рис.1. Графики зависимостей МКО от угла падения при различных геометриях образца и различных поляризациях на частоте 6 ГГц.

На рисунке 2 изображено двумерное распределение МКО в зависимости от угла падения и частоты при Н-поляризации и для различных геометрий. Отсутствуют структурные различия, на двумерной картине для прямоугольной геометрии более выраженный пик. Отметим, что в обоих случаях происходит рост угла Брюстера в зависимости от частоты, при этом у прямоугольной гео-

метрии рост интенсивнее. Распределение МКО для шестиугольника аналогично случаю прямоугольной пластины, а распределение МКО для параллельной геометрии расположения квадрата аналогично случаю диагональной геометрии.

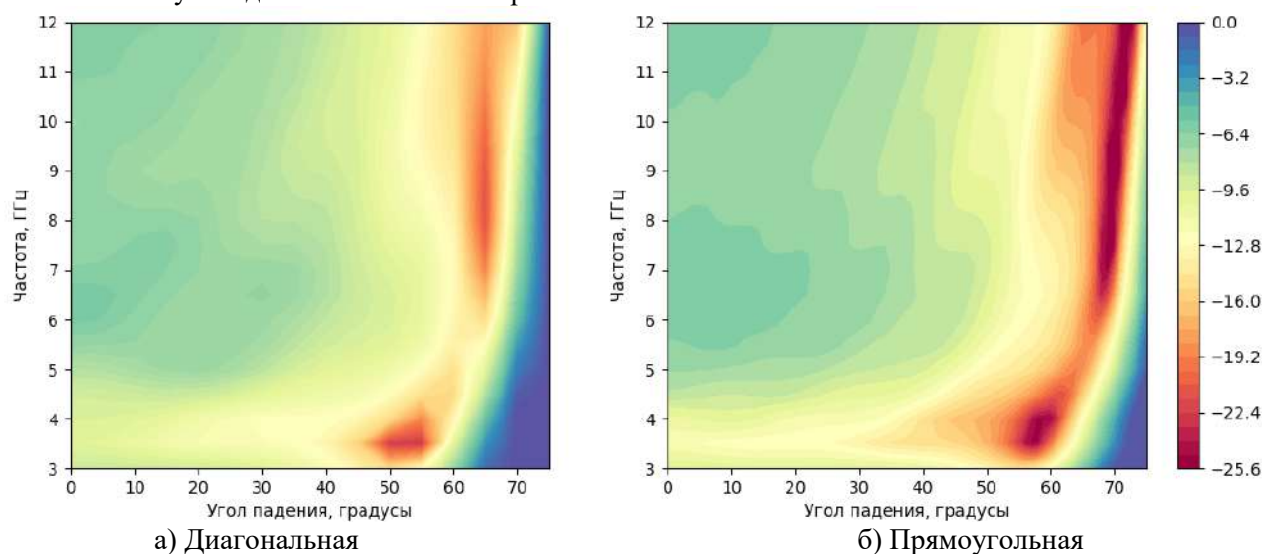


Рис.2. Зависимость МКО от часты и угла падения (Н-поляризация)

Проведенные вычисления позволяют утверждать, что краевые эффекты сильно влияют на точность измерения МКО, при этом расположение образца относительно поляризации падающей волны имеет меньшее значение, чем размер образца, удаленность его краев от центра вращения.

Литература

1. Knott E.F., Shaeffer J.F., Tuley M.T. Radar cross section. Boston: SciTech Publishing, 1993, second edition, 477 p.
2. Бреховских Л.М. Волны в слоистых средах. М.: Наука, 1973. 503 с.

УДК 538.911

Разработка управляемой частотно-селективной поверхности для СВЧ диапазона на основе тонких плёнок VO₂

**В.И. Полозов^{1,2}, С.С. Маклаков¹, С.А.Маклаков¹, Д.А. Петров¹, А.Д. Мишин¹, В.А. Чистяев¹,
А.А. Политико¹, К.М. Басков¹, В.Н. Кисель¹**

¹Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Управляемые частотно-селективные поверхности (ЧСП) широко используются при создании конфигурируемых пространственных фильтров, модуляторов, устройств для управления поляризацией в СВЧ, ИК и ТГц диапазонах. Тонкие плёнки VO₂ могут быть использованы в качестве элементов управления ЧСП вместо PIN-диодов, микроэлектромеханических систем, ферритов или варикапов, поскольку обладают резким переходом диэлектрик-металл (ПДМ), происходящем при нагреве или приложении электрического напряжения. Применение таких плёнок в ЧСП позволит уменьшить вносимые потери, увеличить быстродействие, уменьшить стоимость устройств и их массу [1]. Тем не менее, в настоящее время на основе VO₂ созданы управляемые ЧСП только для ИК и ТГц диапазонов. Создание таких ЧСП для СВЧ диапазона требует нанесения плёнок VO₂ большой площади, соответствующей длине волны излучения. Синтез плёнок с однородными свойствами на большой площади сопряжён с существенными сложностями, поскольку параметры ПДМ очень чувствительны к фазовому составу и морфологии поверхности плёнок [2].

Нами разработан метод синтеза, позволяющий получать поликристаллические плёнки VO₂ толщиной 120 нм с отношением сопротивлений плёнок в диэлектрическом (при 30°C равно 3,5·10⁵ Ом/□) и металлическом состояниях (при 80°C равно 220 Ом/□) Rs/Rm=1600 [3]. Плёнки получены

методом высокочастотного реактивного магнетронного распыления с последующим высокотемпературным отжигом в инертной атмосфере. ПДМ происходит при 53 °С. Площадь поверхности плёнок составляет 30 см². Плёнки обладают высокой однородностью свойств по всей площади. Также плёнки обладают высокой адгезией к подложке, что позволяет проводить их жидкостное травление, создавая элементы микронного размера, а также механическую обработку.

На основе этих плёнок была собрана управляемая ЧСП, частотный отклик которой зависит от состояния тонких плёнок VO₂. ЧСП была создана на полученных плёнках при помощи фотолитографии с последующим химическим травлением и lift-off процессом. Когда VO₂ находится в диэлектрическом состоянии (при комнатной температуре), ЧСП представляет собой полосовой фильтр с центральной частотой 8 ГГц и полосой пропускания по уровню 3 дБ в 4.83 ГГц. Когда VO₂ находится в металлическом состоянии (при 80 °С), ЧСП является отражателем: во всей измеренной полосе частот (2-18 ГГц) коэффициент отражения составляет -2.2 дБ.

Реализованный двухстадийный процесс позволяет получать тонкие плёнки VO₂ с высокой амплитудой ПДМ. Хорошая адгезия плёнок позволяет проводить их механическую обработку и химическое травление. Сохраняющаяся после обработки высокая амплитуда перехода, однородная по площади плёнок, позволяет использовать плёнки в управляемых ЧСП для СВЧ диапазона.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №20-33-90067.

Литература

1. V. Polozov *et al.* Thermally Tunable Frequency-Selective Surface Based on VO₂ Thin Film // Phys. Status Solidi A. 2020. P. 2000452
2. V. Polozov *et al.* Blow-up overheating instability in vanadium dioxide thin films // Phys. Rev. B. 2020, V. 101, P. 214310
3. S. Maklakov, V. Polozov, *et al.* Post-deposition annealing of thin RF-magnetron sputter-deposited VO₂ films above melting point. // Journal of Alloys and Compounds. 2018. V. 763. P. 558-569

УДК 669-1

Синтез и магнитные свойства порошка железа, полученного с помощью метода спрей-пиролиза

А.В. Косевич¹, С.С. Маклаков¹, А.С. Набоко¹, Д.А. Петров¹, П.А. Зезюлина¹, Е.А. Колесников², В.В. Лёвина², К.В. Похолок³, Д.С. Филимонов³

¹Институт теоретический и прикладной электродинамики РАН

²Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

³Московский государственный университет им. Ломоносова

Спрей-пиролиз – современный метод, позволяющий получать наноструктурированные порошки оксидов или металлов из полых микрочастиц. В основе метода лежит термическая сушка и термическое разложение аэрозольной капли исходного солевого раствора. Недавно появились сообщения о получении полых частиц Ni и Co. Синтез полых частиц Fe этим методом сейчас находится в стадии разработки.

Полые железные микросферы получали из 10%-ного водного раствора нитрата железа с помощью метода спрей-пиролиза и затем восстанавливали в водороде. Толщина «стенки» частиц составляла $\approx 1/4$ диаметра, средний диаметр – 700 нм. Плотность полученного порошка, измеренная путем вытеснения жидкости, составила 6,0 г/см³, что на 25% ниже плотности карбонильного железа (CI) (7,9 г/см³).

На первом этапе – спрей-пиролиза – были получены полые микросферы из Fe₂O₃ [1]. Восстановление до Fe проводилось при 450 °С в потоке водорода [1] до исчезновения следов воды в отработанном газе. Восстановление оксида не изменило средний размер частиц. Рентгеноструктурный анализ показал, что в восстановленном металле присутствуют фазы α -Fe и Fe₃O₄. Количественный анализ γ -резонанса показал, что доля α -Fe в полученном материале составляла 80%. Оксидная фаза Fe₃O₄ образовалась в результате реакции мелкодисперсного порошка с кислородом воздуха. Намагниченность насыщения порошка составляла 184 $\pm$ 9 етл/г, что соответствует CI. Коэрцитивная сила составляла 157 $\pm$ 11 Э.

Тонкий слой SiO_2 наносился на поверхность частиц железа гидролизом тетраэтоксисилана в водно-спиртовой среде [2]. Диэлектрический слой SiO_2 предотвращает агломерацию и электрические контакты. Результаты СЭМ показали, что толщина оболочки составляет 50-100 нм. Содержание SiO_2 было оценено в 15 мас.% (25 об.%) путем сравнения намагниченности насыщения порошков Fe и Fe@SiO_2 .

Полученный материал показал ферромагнитный резонанс на частоте 18 ГГц. Кривая дисперсии мнимой части магнитной проницаемости показала один максимум на частоте 10 ГГц. Типичный максимум, который обычно наблюдается для CI на 2 ГГц, здесь не был обнаружен. Композиты с диэлектрической матрицей и полученным наполнителем обладают более высокой диэлектрической проницаемостью, чем композиты с наполнителем CI. Оболочка из SiO_2 значительно снизила квазистатическое значение реальной части диэлектрической проницаемости композитов, заполненных 66 мас.% Fe@SiO_2 : с 24 до 7.

Полученные порошки Fe и Fe@SiO_2 пригодны для холодного прессования. Плотность прессованных таблеток составляла 4,1 г/см³ и 3,5 г/см³, соответственно.

Оптимизация условий синтеза – это путь к направленному изменению как толщины «стенки», так и размера полых железных микросфер. Это представляет фундаментальный интерес для экспериментальных исследований микроволновой проницаемости ферромагнитных порошков.

Литература

1. N. Shatrova. et al. Elaboration, characterization and magnetic properties of cobalt nanoparticles synthesized by ultrasonic spray pyrolysis followed by hydrogen reduction // Mater. Res. Bull. 2017. V. 86. P. 80-87.
2. Maklakov S. S. et al. Corrosion-resistive magnetic powder Fe@SiO_2 for microwave applications // J. Alloy. Compd. 2017. V. 706. P. 267-273.

УДК 539.192

Создание дефазирующими резервуарами долгоживущего запутанного состояния в системе двух кубитов

И.В. Вовченко¹, В.Ю. Шишков^{1,2,3}, Е.С. Андрианов^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН.

³Всероссийский НИИ автоматики имени Н. Л. Духова

Рассмотрена динамика системы, состоящей из двух сильно взаимодействующих двухуровневых систем (ДУС), каждая из которых подключена к своему дефазирующему резервуару. Также обе ДУС взаимодействуют с общим резервуаром излучения. Гамильтониан, описывающий данную систему, исследовался в приближении вращающейся волны [1].

Численное моделирование уравнения, при начальных условиях $\hat{\rho}_S(0) = |ee\rangle$, показало, что в системе образуется долгоживущее, запутанное состояние, практически полностью определяющееся состоянием $(|eg\rangle - |ge\rangle)/\sqrt{2}$, в котором находится на временах $10^4 \leq \omega t \leq 10^7$, позже релаксируя в состояние $|gg\rangle$. Наличие двух пиков энтропии указывают на два процесса релаксации. Первый связан с переходом с $|ee\rangle$ на лежащие ниже по энергии, второй связан с тепловым перебросом фотонов с антисимметричного уровня на симметричный и последующей релаксацией системы в состояние $|gg\rangle$. Конкьюренс (вычислялся по формуле для ансамбля ДУС из [2]) данного состояния приблизительно равен 0.95.

Чтобы продемонстрировать, что появление запутанности не является следствием наличия общей радиационной бани, мы провели те же расчёты, занулив константы взаимодействия системы с дефазирующими резервуарами. При данных условиях, конкьюренс системы всё время равен нулю, а в энтропии есть всего один пик, связанный с параллельной релаксацией системы из верхнего состояния через симметричное в основное, и прямой релаксацией из верхнего состояния в основное.

Оценить время жизни данного состояния можно, сделав переход в базис собственных векторов гамильтониана и составив уравнения на числа заполнения. В пределе $\hbar\Omega \ll kT$, при тех же начальных условиях, получено, что время жизни состояния экспоненциально больше характерных времён излучения и дефазировки.

Литература

1. Scully, M.O. and M.S. Zubairy, *Quantum optics*, 1999, American Association of Physics Teachers.
2. Wootters, W.K., Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits. *Physical Review Letters*, 1998. 80(10): p. 2245-2248.

УДК 538.945

Спонтанные деформация и намагниченность в легированном топологическом изоляторе

Р.Ш. Акзянов^{1,2,3}, А.В. Капранов², А.Л. Рахманов^{1,2,3}

¹Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Нами изучены необычные свойства топологической сверхпроводимости в легированных топологических изоляторах, таких как $A_xBi_2Se_3$, где $A = Cu, Nb, Sr$ [1]. Исследованы два типа сверхпроводимости: киральная и нематическая. Нематическая сверхпроводимость описывается двухкомпонентным параметром порядка E_u с симметрией, который может быть представлен действительным вектором. Нематическая сверхпроводимость имеет нетривиальную связь с деформацией. В ряде работ было экспериментально показано, что деформация приводит к одноосной анизотропии магнитосопротивления, не совпадающей с гексагональной симметрией кристалла. Также была обнаружена спонтанная деформация кристаллической решетки при переходе в сверхпроводящее состояние. Ее величина составляет $\delta l / l \approx 10^{-7}$, уменьшается с ростом температуры, и обращается в нуль при переходе в нормальное состояние.

Альтернативным сверхпроводящим состоянием с E_u симметрией является киральная фаза. В данном состоянии симметрия относительно обращения времени нарушается, а параметр порядка представляет собой двухкомпонентный комплексный вектор. Недавние эксперименты показали наличие киральной фазы в тонких пленках легированных топологических изоляторов.

Теория Гинзбурга-Ландау позволяет успешно описать макроскопические свойства сверхпроводимости в легированных топологических изоляторах с векторным параметром порядка $\vec{\eta} = (\eta_1, \eta_2)$. Свободную энергию этой фазы можно представить в виде:

$$F = A(|\eta_1|^2 + |\eta_2|^2) + B_1(|\eta_1|^2 + |\eta_2|^2)^2 + B_2|\eta_1^*\eta_2 - \eta_1\eta_2^*|^2,$$

где $A \propto T - T_c < 0$, $B_1 > 0$, а B_2 может быть как положительным, так и отрицательным. Нематическому состоянию соответствует действительный параметр порядка $\vec{\eta} = \eta(\cos \alpha, \sin \alpha)$, а киральному состоянию комплексный $\vec{\eta} = \eta(1, \pm i)$.

В случае групповой симметрии D_{3d} топологического изолятора, такого как Bi_2Se_3 , имеются дополнительные симметрии A_{2g} и E_g . В этом случае возможно появление дополнительных слагаемых в свободной энергии, которым соответствуют билинейные члены:

$$E_g \rightarrow (N_1, N_2) = (|\eta_1|^2 - |\eta_2|^2, \eta_1^*\eta_2 + \eta_1\eta_2^*),$$

$$A_{2g} \rightarrow M_0 = \eta_1^*\eta_2 - \eta_1\eta_2^*.$$

При этом нематическому состоянию соответствует $E_g \text{ с } M_0 = 0$, а киральному состоянию $A_{2g} \text{ с } (N_1, N_2) = (0, 0)$. Именно эти дополнительные слагаемые и приводят к связи сверхпроводимости с намагниченностью и деформацией. Соответствующий вклад в функционал Гинзбурга-Ландау имеет структуру:

$$2iM_z M_0 g_M + \left[(U_{xx} - U_{yy}) N_1 + 2U_{xy} N_2 \right] g_N,$$

Где M_z -- намагниченность вдоль кристаллографической оси c , а U_{ij} -- компоненты тензора деформации в кристаллографической плоскости (a, b) . Таким образом, нематическое состояние связано с деформацией, а киральное состояние связано с намагниченностью. Другими словами, нематичесность и деформация «конкурируют» с киральностью и намагниченностью.

В нашей работе [1] показано, что в топологическом сверхпроводнике возникает либо спонтанная деформация, либо спонтанная намагниченность в зависимости от параметров системы. Спонтанная деформация наблюдается в случае нематической симметрии сверхпроводящего параметра порядка $\vec{\eta} = \eta(\cos \alpha, \sin \alpha)$, в то время как спонтанная намагниченность в случае киральности $\vec{\eta} = \eta(1, \pm i)$ (Рис.1а). Нами также изучено влияние начальной деформации и приложенного магнитного поля на симметрию параметра порядка. Показано, что с ростом приложенного магнитного поля происходит переход нематического порядка в киральный (Рис.1б), а с ростом начальной деформации киральное состояние переходит в нематическое. Предсказаны скачки магнитной восприимчивости и жесткости в точках перехода. Обсуждена связь полученных результатов с недавними экспериментальными наблюдениями.

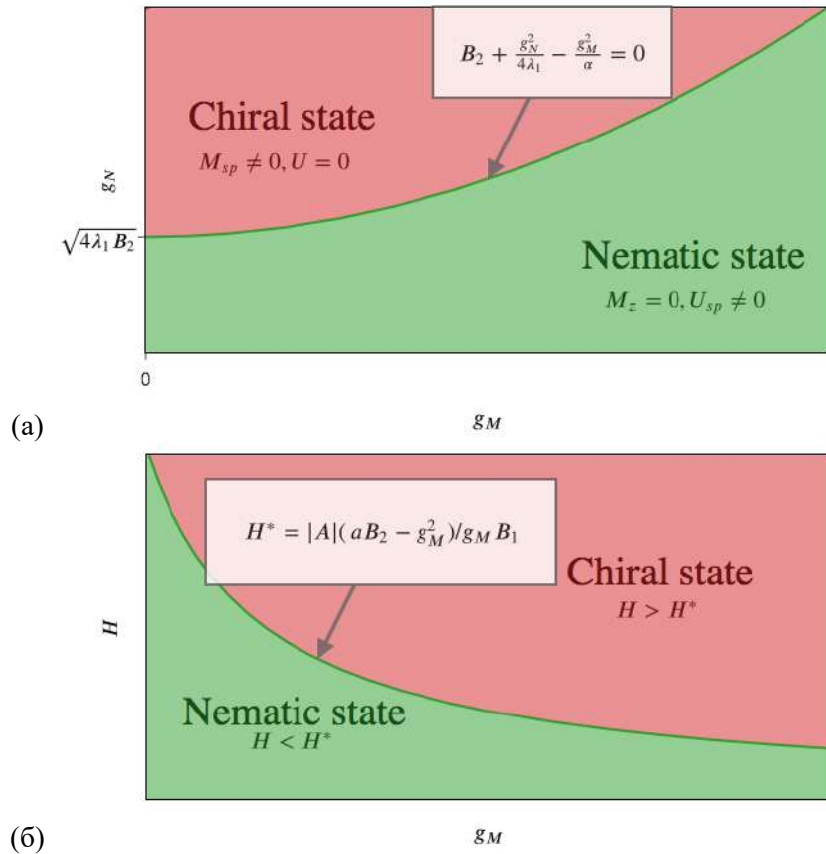


Рис.1. (а) Фазовая диаграмма для деформации и намагниченности, где $\lambda_1 = \lambda_{zzzz}$ один из упругих модулей кристалла с гексагональной симметрией и (б) фазовая диаграмма для магнитного поля.

Литература:

1. . Spontaneous strain and magnetization in doped topological insulators with nematic and chiral superconductivity, Phys. Rev. B 102, 100505(R) (2020).

Электроосаждение супермаллоя NiFeMo на подслое меди**А.В. Долматов^{1,2}, С.С. Маклаков², Д.А. Петров², П.А. Зезюлина²**¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Супермаллой – магнитомягкий материал, отличающийся от пермаллоя более высоким удельным сопротивлением и проницаемостью, что необходимо для изготовления более качественных индукторов [1]. Несмотря на то, что электроосаждение пермаллоя является отработанным в промышленности процессом, осаждение супермаллоя вызывает некоторые трудности, связанные с гальванизацией молибдена из водного раствора. Сам по себе молибден не может быть осажден на подложку гальваническим способом, однако в случае соосаждения с металлами группы железа такой процесс становится возможным [1]. Для создания новых материалов для свч техники нужны слои супермаллоя толщиной несколько микрон, не все способы получения NiFeMo смогут гарантировать слои такой толщины.

На основании работы [1] осуществлено осаждение супермаллоя на медную подложку. Осаждение осуществляли в трехэлектродной химической ячейке, в качестве рабочего электрода использовали фольгированный текстолит со слоем меди 18 мкм, перед нанесением слоя супермаллоя, поверхность меди очищали в растворе хлорида железа с концентрацией 0.2г/мл в течение 10 минут. Состав электролита также взяли из работы [1]: NiSO₄, 6H₂O (60 г/л), FeSO₄, 7H₂O (4 г/л), Na₂MoO₄, 2H₂O (2 г/л), NaCl (10 г/л), C₆H₈O₇ (citric Acid) (66 г/л). Осаждение осуществляли при потенциале - 1.35В относительно хлорид серебряного электрода в течение 30 минут. По окончании процесса, рабочий электрод помещали в вакуум на 24 часа.

Плотность тока в течение процесса составила 12мА/см², по закону Фарадея, масса осажденного слоя должна составлять ≈1мкг, в предположении, что осевший материал имеет плотность пермаллоя, это должно давать толщину слоя ≈1мкм. По результатам оптической интерферометрии, толщина слоя составляет 1±0.4 мкм, наибольший вклад в разброс по толщине внесли неоднородности по толщине как самого слоя супермаллоя, так и неоднородности медной подложки. По результатам электронной микроскопии, образец имеет сильно-развитую поверхность в виде зерен, диаметром 800±200 нм. Локальный рентгеноспектральный анализ показал, следующее соотношение компонент в образце (в атомных процентах) : Ni – 48%, Fe- 48%, Mo – 4%. Экспериментально измерены такие магнитные свойства образца, как Коэрцитивная сила = 20 Э, и поле насыщения 1500-1700 Э, при площади образца 4.5 см² и толщине 1мкм, эти величины соразмерны с магнитными характеристиками супермаллоя.

По работе, можно сделать следующие выводы: Электроосаждение смеси, состоящей из 3х солей, на медную подложку привело к получению магнитомягкого материала с магнитными свойствами, схожими с пермаллоем. Дальнейшая работа будет заключаться в исследовании электродинамических характеристик образцов, создания новых образцов, в сравнении электродинамических и магнитостатических характеристик образцов NiFe (пермаллой) и NiFeMo (супермаллой).

Литература

1. G. Nabyouni, I. Kazeminezhad, MAGNETIC AND NANOSTRUCTURAL CHARACTERISTICS OF ELECTRODEPOSITED SUPERMALLOY (Ni-Fe-Mo) THIN FILMS, in, 2012.

Научное издание

Труды
63-й Всероссийской научной конференции МФТИ

23–29 ноября 2020

Фундаментальная и прикладная физика

Составители:
Д.А. Диких, Е.Ю. Чиркина

Редакторы:
В.А. Дружинина, И.А. Волкова

Набор и вёрстка:
Д.А. Колпаков

Подписано в печать 20.11.2020. Формат $60 \times 84 \frac{1}{8}$. Усл. печ. л. 65,25. Тираж 70 экз. Заказ №44.
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»
141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9

Отпечатано в полном соответствии с предоставленным оригиналом-макетом
Типография «М-Принт»
105082, г. Москва, ул. Ф.Энгельса, д.75, стр.21



**Контактная информация
оргкомитета конференции:**

117303, г. Москва, ул. Керченская, д. 1А, корп. 1
+7 498 744-65-52
conf@mipt.ru

**Официальный сайт
конференции**
conf.mipt.ru

ISBN 978-5-7417-0754-8



9 785741 707548 >