Министерство образования и науки Российской Федерации

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования Московский физикотехнический институт (государственный университет)





60-я Научная Конференция Мфти

Москва, Долгопрудный, Жуковский 2017

ТРУДЫ 60-Й всероссийской научной конференции мфти

20-26 ноября 2017 года

Фундаментальная и прикладная физика Министерство образования и науки Российской Федерации

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)»

Труды 60-й Всероссийской научной конференции МФТИ

20 - 26 ноября 2017 года

Фундаментальная и прикладная физика

Москва Долгопрудный Жуковский МФТИ 2017 УДК 53 ББК 22.3 Т78

Т78 Труды 60-й Всероссийской научной конференции МФТИ.
 20–26 ноября 2017 г. Фундаментальная и прикладная физика. М.: МФТИ, 2017. - 350 с.
 ISBN 978-5-7417-0650-3

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

> УДК 53 ББК 22.3

ISBN 978-5-7417-0650-3

© Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)», 2017

Оглавление

Программный комитет конференции	17
Организационный комитет конференции	18
Секция общей физики	19
А.С. Дзарахохова, Н.П. Зарецкий, А.В. Максимычев, Л.И. Меньшиков, П.Л. Меньшико О возможности создания сверхмощного импульсного источника характеристического рентгеновского излучения на основе компактного ускорителя тяжёлых ионов в магнитном поле, сжимаемом газовым лайнером	ов 19
Е.М. Стадничук	
Электронные лавины в грозовом облаке	20
Е.С. Буракова, Н.С. Шубина, А.М. Перепухов, А.В. Максимычев, В.М. Негримовский Изучение мицеллообразования плюроника F68 в водных растворах	21
<i>Е.О. луценко</i> Обработка данных тестирования прототипа электромагнитного калориметра LumiCal	23
В.А. Шпотя, А.М. Перепухов, А.В. Максимычев, В.И. Гомзяк, С.Н. Чвалун Определение строения гиперразветвленного полиэфира BOLTORN методом ЯМР-спектроскопии	24
 Н.С. Шубина, Е.С. Буракова, А.М. Перепухов, А.В. Максимычев, Ш.Р. Фролова, К.И. Агладзе Изучение фотоизомеризации АгоТАВ и СТАВ при взаимодействии с кардиомиоцитами методами ЯМР 	26
М.А. Юденкова, Е.С. Егорова	
Исследование зависимости размера капли сателлита от размеров основной капли В.С. Теплов, В.Д. Бессонов, А.В. Телегин	27
Спектр тепловых магнонов в пленках железо-иттриевого граната	29
<i>М.Е. Зелёный, А.В. Зелёная</i> Применение транспортного кода GEANT4 в задачах рентгеновской и гамма- томографии и неразрушающего контроля	30
В.Е. Лазарева, Е.С. Серягина, О.И.Смирнова	
Условия использования датчиков теплопроводности для исследования взаимной диффузии газов	32
Секция фотоники и двумерных материалов	35
<i>И.А. Храмцов, Д.Ю. Федянин</i> Увеличение яркости однофотонных источников на основе алмаза в обход технологических ограничений легирования	35
И.А. Храмцов, Д.Ю. Федянин Корреляция между одиночными фотонами, испускаемыми центрами окраски в алмазе при электрической накачке	36
К.В. Воронин, Ю.В. Стебунов, А.В. Арсенин Высокочувствительные биосенсоры на основе плазмонных кольцевых микрорезонаторов	37
А.А. Вишневый, Д.Ю. Федянин Бистабильность в металл-полупроводниковых нанолазерах, вызванная саморазогревом	
have here and here	

4		

А.С. Петров, Д.А. Свинцов	
Общая теория токовых неустойчивостей в транзисторных структурах на основе двумерных электронных систем	40
А.В. Писаренко, Д.А. Колымагин, Д.А. Чубич	
Метод STED-фотолитографии для создания фотонных структур	41
А. Былинкин, В. Еналдиев, Д. Свинцов	
Неупругое туннелирование с участием плазмонов в ван-дер-ваальсовых структурах на основе графена	42
И.М. Фрадкин, Д.Ю. Федянин	
Формализм квазинормальных мод и его использование для описания оптических нанорезонаторов.	42
М.К. Маслов, А.С. Петров, Д.А. Свинцов	
Плазменные неустойчивости двумерных электронов в полевом транзисторе с асимметричным затвором	44
А.К. Нухов	
Наноструктурирование метаматериалов с использованием графена	46
Секция прикладной оптики	48
$C \Gamma$ Source $A H V$ V T H H V T H T A H T A H T A B P A H	
С.1. Зеневич, А.Ю. Климчук, Б.М. Семенов, Д.Б. чуройнов, А.Б. Гооин Компактный гетеролицный спектрометр ближнего ИК-лианазона, ная	
мониторинга СО ₂ в атмосфере Земли	48
A.I. Milanich. Rohith Sasi	
Stereoscopic vision and its 3D testing	50
С.В. Блинов	
О проверке твёрдой связи кулонова поля с источником заряда	52
А.И. Миланич	
Анализ экспериментов по отклонению света гравитацией Солнца	54
Чжэел Рю, А.Н. Путилин	
Виртуальные дисплеи: тенденции, оптические системы и проблемы	57
Секция теоретической физики	59
$R \ni Rathward A B Muxeenword A B IIIeanubenz A \Phi Fanabanoe$	
Термолинамические свойства Л-D-B двумерной модели Гейзенберга	59
πH Acmparature $\Im T$ Armedor	
Квантовая теория поля в лвух измерениях с нетривиальными граничными	
условиями	60
С.С. Волков, Н.Л. Пузевич, Ю.Е. Дмитревский, Т.И. Китаева, С.В. Николин, А.Б. Дн А.С. Сафошкин	обуа,
Электромагнитные поля и электрические токи в конденсированных средах	61
Н.С. Виноградов, А.Б. Дюбуа, А.Н. Конюхов, С.И. Кучерявый, С.Н. Машнина, А.С. Сафошкин	
Температурные зависимости времени электрон-электронных взаимодействий в полупроводниковых гетероструктурах	63
А.Б. Дюбуа, А.Н. Конюхов, С.И. Кучерявый, С.Н. Машнина, В.В. Потапова,	
А.С. Сафошкин	
Дифракция электромагнитной волны на квантовой структуре	65
С.О. Алексеев, Э.Т. Ахмедов	
Динамический эффект Казимира и секулярно растущие петлевые поправки	67

5

G. Saget, A.M. Ishkhanyan, C. Leroy, T.A. Ishkhanyan	
A periodic level-crossing two-state model of a general Heun class	8
В.П. Бурский	
Об эквивариантных граничных задачах и энергетических уровнях	0
Сокуша бионововатома с шаровым ядром	ז ר
Секция бионанофизики	2
А.С. Казанцев, Ю.Л. Рижиков, Ю.С. Ковалёв, Д.В. Соловьёв, А.И. Иваньков, В.В. Чупин, А.И. Куклин	
Исследование возможностей улучшения точности калибровки установки малоуглового рентгеновского рассеяния72	2
А.В. Власов, Ю.Л. Рижиков, Н.М. Курбатов, А.И. Куклин, Н.А. Денчер, В.И. Горделий	
Малоугловые рентгеновские исследования АТФ-синтазы, встроенной в нанодиски	3
А.В. Васильева, В.Р. Черкасов, М.П. Никитин	
Реализация лиганд-зависимых элементов булевой логики на основе ДНК- опосредованной самосборки наночастиц7	5
Е.В. Марьин, А.П. Лугинина, А.Ю. Гусач, А.В. Мишин, К.В. Ковалёв, Д.Н. Забельский, В.И. Борщевский, В.Г. Черезов	
Сбор и обработка данных в серийнной кристаллографии мембранных белков	5
С.С. Бухдрукер, Е.В. Марьин, М.Б. Шевцов, М.Н. Кадукова, К.В. Ковалев, П.А. Попов, С.В. Грудинин, Н.В. Струшкевич, А.А. Гилеп, В.И. Борщевский	
Рентгеноструктурный анализ цитохромов Р45070	6
А.Е. Бурдакова, А.Ю. Гусач, А.П. Лугинина, П.А. Попов, Н.А. Сафронова, Е.А. Ляпина, А.В. Мишин, В.Г. Черезо	
Подготовка CysLT2 рецептора к структурно-функциональным исследованиям7	8
И.В. Маслов, Н. С. Ильинский, Н.А. Сафронова, А.О. Богородский, М.Б. Шевцов, Н.Л. Маляр, П.К. Кузьмичев, А.В. Мишин, В.Г. Черезов, В.И. Борщевский	
Изучение конформационной динамики мембранных белков методом флуоресцентной микроскопии одиночных молекул	9
Н. Сафронова, А. Лугинина, В. Вистунов, А. Гусач, А. Бурдакова, А. Мишин, В. Черезов	
Экспрессия и очистка рецептора GPR178	0
А. В. Лунин, М. П. Никитин	
Функционализированные липосомы – перспективные наноагенты для создания лиганд-чувствительных нанокомплексов биомедицинского назначения	1
Ю.Л. Рижиков, М.Ю. Николаев, Д.В. Забельский, Т.Н. Муругова, А.И. Куклин, В.И. Горделий	
Структура полноразмерного комплекса NpSRII/NpHtrII	2
Д.Д. Романовская, П.А. Попов	
Разработка дескриптора для описания интерфейса взаимодействия GPCR- лиганд	3
С.В. Баженов, Т.Ю. Углова, А.Н. Ельников, Н.В. Кловач, И.В. Манухов	
Анализ микрофлоры язвенных повреждений кожных покровов дальневосточной горбуши	4
М.В. Павельченко, С.В. Баженов, М.Н. Коноплева, И.В. Манухов	
Видовой состав психрофильной люминесцирующей микрофлоры кишечника рыб Белого, Берингова и Охотского морей8	7

А.И. Доорынин, А.Н. Дуоенко, Н.С. Ильинскии	
Воздействие антиоксидантов на молекулярные механизмы старения: замедлен	ие
укорачивания теломер и повреждения митохондрий в условиях окислительног	°O o
Стресса $A = B_{\pi,\alpha,\alpha,\alpha} + M = D_{\mu,\alpha,\mu} + M = D_{\mu,\alpha,\mu} + M = M = D_{\mu,\alpha,\mu} + M = M = D_{\mu,\alpha,\mu} + M = D_{\mu,\alpha,\mu} + M = D_{\mu,\alpha,\mu} + M = D_{\mu,\alpha,\mu} + D_{\mu,\alpha,\mu$	0
А.А.1 инченко, А.Д.Длисов, Ю.Л.1 ижиков, Д.И.1 ороелии, А.И.Куклин Исспелования светоиндушированных структурных изменений в мутанте	
бактериородопсина D96N методом МУРР	9
А.Н. Юденко, Н.А. Беседина, А.Б. Улитин, В.М. Екимова, С.Р. Евдокимов, Ю.В. Путинцева, П.А. Яковлев, М.И. Ломовская, И.Е. Елисеев	
Исследование термодинамических свойств VHH-антитела против рецептора ErbB3	9
M. Kadukova, S. Grudinin, V. Chupin	
Knowledge-based prediction of protein-ligand interactions	9
Секция проблем квантовой физики, электрофизики, квантовой радиоф	оизики
проблем физики и астрофизики	9
А.В. Копьев	
Симметрия распределения тензора скоростей деформации в случайных изотропных несжимаемых потоках	9
Р.Д. Звагельский, Д.А. Колымагин, Д.А. Чубич, А.Г. Витухновский	
Оптические свойства периодических структур, созданных методом STED-DL фотолитографии	W 9
Д.А. Комиссар, М.Т. Метлин , С.А. Амброзевич, И.В. Тайдаков	
Люминесценция β-дикетонатных комплексов на основе трехзарядного иона гольмия	9
А.И. Хирьянова, С.И. Ткаченко	
Анализ интерферограмм, полученных на малых плазменных объектах	9
К.С. Кислов, А.А. Нариц, В.С. Лебедев	
Исследование процессов резонансной трехчастичной и диссоциативной электрон-ионной рекомбинации в плазме, содержащей атомарные и	0
молекулярные ионы	9
К.С. Кислов, А.А. Нариц, В.С. леоеоев Образование атомов в ридберговских состояниях в тройных столкновениях	10
Have T_{rate} T_{a} $A = K_{outdoncurvit} B C = T_{a} \delta_{a} \delta_{a}$	10
Моделирование спектров поглощения и рассеяния света золотыми и серебряными нанодисками и нанопризмами	10
О.А. Бурдукова, В.А. Петухов, М.А. Семенов	
Квазипродольная накачка лазера на красителях зелеными полупроводниковым лазерами	ии 10
А.И. Гончарук, М.А. Григорьев	
Конформные поля на пространстве анти-де-Ситтера. Метод объемлющего пространства	10
Д.В. Сычев, А.Е. Уланов, А.А. Пушкина, Е.С. Тиунов, В.А. Новиков, А.И. Львовски	й
Запутанность между оптическими кубитами, закодированными в квадратурной и поляризационном базисах	м 10
А А Астахов В Г. Пирельсон	
n.n. nemaxoo, b.r. Hapenocon	

6

Е.В. Есингильдинов, Ю.Д. Заварцев, М.В. Завертяев, А.И. Загуменный, В.А. Козлов, Кутовой, Н.В. Пестовский, А.А. Петров, А.А. Родионов и С.Ю. Савинов	С.А.
Спектры импульсной катодолюминесценции диоксида кремния	112
А.А. Родионов, А.В. Агафонов, А.В. Огинов, К.В. Шпаков, И.С. Байдин	
Многоканальный сцинтилляционный комплекс диагностик для исследований рентгеновского и гамма-излучений предпробойной стадии протяженного атмосферного разряда установки ЭРГ	114
Д.О. Горячий, А.А. Ващенко, А.Н. Асландуков, В.В. Уточникова	
Органические светоизлучающие диоды на основе комплексов тербия с использованием новых хост материалов	115
Секция современных проблем теоретической физики и физики	
конденсированного состояния	117
А.В. Лункин	
Модель Китаева с возмущением: спектр возбуждений и спиновые корреляционные функции на больших расстояниях	117
П.Л. Строганов	
Расщепление куперовских пар в баллистических ферромагнитных СКВИДах	117
П.Д. Курилович	
Транспорт вдоль края 2D-топологического изолятора при наличии магнитной примеси	118
В.Д. Курилович	
Транспорт вдоль геликоидального края в присутствии анизотропной магнитной примеси	118
Л.В. Гинзбург, И.Е. Батов	
Когерентный электронный транспорт в диффузионных контактах Al/InAs- нанопроволока/Al	119
А.В. Орлов	
Формирование когерентных структур в двумерной турбулентности	120
Л.Л. Огородников	
Эволюция магнитного поля в квазидвумерном случайном потоке	122
Секция физики низких температур	124
С.К. Готовко, Л.Е. Свистов	
Влияние электрического поля на антиферромагнитный резонанс в мультиферроике CuCrO ₂	124
С.А. Лемзяков, М.А. Тарасов, В.С. Эдельман	
Исследование времени отклика приемника с СИНИС-болометром на частоте 35 ГГц	0 125
Г.А. Пензяков, Т.Е. Голикова, Д.С. Львов, И.С. Рожков, Н.В. Сурьянинова, А.А. Марунченко, С.В. Егоров, В.В. Рязанов	
Об аномальном поведении сопротивления алюминиевого провода вблизи критической температуры сверхпроводящего перехода	127
А.Б. Дровосеков, Н.М. Крейнес, А.О. Савицкий, Д.И. Холин, Е.А. Кравцов, М.В. Ряб	бухина
Влияние прослойки Cr на структурные и магнитные свойства слоистых структур Fe/Cr/Gd	р 129

T. P. Zaumanana A. A. Fafatizoo H. P. Focomus P. F. Wommung 2. H. Onmood	
Д.Б. Замиусская, А.А. Баоаилов, И.Б. Говорун, Б.Г. Жотиков, Э.П. Осипова,	
Е.Л. Остапов, А.В. Басалаев	
Моделирование и исследование ударных волн в микроканалах на основе газокинетической теории Больцмана	132
М.М. Гаспарян, Ю.Ю. Клосс, Ф.Г. Черемисин, Е.П. Дербакова, М.В. Калинин,	
А.А. Захаров, Д.О. Михайлов	
Солвер для решения уравнения Больцмана в дискретизованном пространстве	133
М.К. Кравец, В.В. Рябченков, М.Ю. Сметанин, М.Б. Федорова, В.Г. Гришина, А.П. Потапов, О.И. Додулад	
Разработка программных солверов для решения кинетического уравнения в задачах переноса	135
А.Н. Оразбаев, Н.А. Зименков., И.Е. Квасов, Д.В. Мартынов, Д.Ф. Цуриков, П.В. Шувалов, А.В. Сакмаров	
Моделирование свободномолекулярного течения газа через узкие каналы	137
Д.В. Щербаков, Д.Ю. Любимов, И.Э. Калимуллин, С.Э Саркисов, А.В. Морозов, А.В. Лисенко, О.К. Шайхатаров	
Компьютерное моделирование газодинамических процессов в межэлектродном	
зазоре многоэлементного термоэмиссионного электрогенерирующего канала ЯЭУ	140
Е.Г. Орлова	
Генеративно-состязательные сети для симуляции ливней в калориметрах	142
екция вычислительной физики конленсированного состояния	144
•	
А.Б. Мазитов	144
<i>А.Б. Мазитов</i> Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144
А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом И.Д. Федоров, В.В. Стегайлов	144
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом И.Д. Федоров, В.В. Стегайлов Сравнение моделей разогретого плотного водорода: волновые пакеты и теория 	144
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом И.Д. Федоров, В.В. Стегайлов Сравнение моделей разогретого плотного водорода: волновые пакеты и теория функционала плотности 	144 146
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144 146
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом И.Д. Федоров, В.В. Стегайлов Сравнение моделей разогретого плотного водорода: волновые пакеты и теория функционала плотности С.В. Поляков, М.В. Федирко Численное исследование релаксационной динамики струны в поле нелинейной квазиупругой силы. 	144 146 147
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом И.Д. Федоров, В.В. Стегайлов Сравнение моделей разогретого плотного водорода: волновые пакеты и теория функционала плотности С.В. Поляков, М.В. Федирко Численное исследование релаксационной динамики струны в поле нелинейной квазиупругой силы	144 146 147
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144 146 147
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144 146 147 149
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144 146 147 149
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144 146 147 149 152
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144 146 147 149 152
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144 146 147 149 152 152
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144 146 147 149 152 152
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144 146 147 149 152 152 152
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144 146 147 149 152 152 154
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144 146 147 149 152 152 154
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144 146 147 149 152 152 154 155
 А.Б. Мазитов Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом	144 146 147 149 152 152 154 155

Секция квантовых явлений в сверхпроводящих системах159
С.Ю. Гребенчук, И.С. Вещунов, В.С. Столяров, Д.С. Баранов, И.А. Головчанский, Л.Я. Винников, Д.Ю. Родичев, А.А. Голубов
Магнитно-силовая микроскопия поверхности ферромагнитного сверхпроводника EuFe ₂ (As _{0.79} P _{0.21}) ₂
Р.А. Оганнисян. И.А. Головчанский. В.С. Столяров. А.А. Голубов
Микромагнитное моделирование эллиптических магнитных джозефсоновских контактов
РР Галиев ИА Гуков В.В. Лремов
Развитие методов исследования живых клеток атомно-силовой микроскопией и высокочувствительным гидрофоном с графеновой мембраной161
А.Г. Шишкин, Д.С. Баранов,С.Ю. Гребенчук, В.В Дремов, А.А. Голубов, В.С. Столяров
Исследование свойств планарных джозефсоновских структур методом магнитно-силовой микроскопии
В.В. Дрёмов, Н.М. Лебедев
Измерение глубины проникновения магнитного поля в магнитный сверхпроводник EuFe ₂ As _{2x} P _x с помощью магнитно-силовой микроскопии165
Секция физики квантовых технологий и квантовой информации166
$B \downarrow Mau vo \Pi \downarrow Man voeuu$
Оптимальная нелинейная фильтрация квантовых состояний 166
Зар Ни Аунг Т.Ф. Камалов
Криптосистемы используемые в квантовой критографии 167
АН Глинов С.Н. Филиппов
Влияние проволящей поверхности на основное состояние зарядового кубита
M R Фёдопов C R Виникевич Л А Григорьев
Поляризация и перепутывание бифотонов в неколлинеарном режиме
спонтанного параметрического рассеяния света
М.В. Федоров, С.В. Винцкевич, Д.А. Григорьев
Корреляционные свойства бифотонов в «субколлинеарном» режиме спонтанного параметрического рассеяния типа I
А.А. Божедаров, И.А. Лучников
Применение методов машинного обучения для предсказания динамики
открытых квантовых систем в реальном эксперименте 1/1
А.М. Магомедрасулов, Л.Е. Федичкин
Моделирование кубитов с помощью квантовых точек. Реализация вентиля Тоффоли, её устойчивость к классическим шумам172
В.Б. Лубсанов, Е.Р. Глушков, В.Л. Гуртовой, О.В. Астафьев
Материалы для однофотонного детектора микроволнового диапазона
В.Л. Гуртовой, В.Б. Лубсанов, Е.Р. Глушков, О.В. Астафьев
Комбинированный держатель образцов для измерений низкотемпературного
электронного транспорта175
В.Н. Мильчаков, Г.П. Федоров, И.Н. Храпач, В.И. Чичков, Ю.И. Зотова
Улучшение добротности сверхпроводящих копланарных структур177
Секция нанооптики и спектроскопии180
Н.В. Зверев, А.А. Юшканов
О взаимодействии Е-волны с тонким слоем невырожденной электронной плазмы 180

П.Н. Мелентьев, А.С. Гритченко, А.С. Калмыков, А.Е. Афанасьев, В.И. Бале А.С. Бабурин, Е.В. Рыжова, И.А. Филиппов, И.А. Родионов, И.А. Нечепуренн А.В. Дорофеенко, И.А. Рыжиков, А.П. Виноградов	ыкин, ко,
Гибридный плазмонный нанолазер	
В.М.Губарев, В.В.Медведев	
Оптические свойства поглотителей ИК-излучения на основе слоистой стр диэлектрик–металл–диэлектрик–металл	руктуры 183
А.И. Зеленеев, С.В. Большедворский, В.В. Воробьев, В.В. Сошенко, В.Н. Сор	окин, А.В.
Акимов	
Оптические и спиновые свойства NV-центров в агрегатах детонационных	X 195
А.А. Разгулов, С.1 Ляпин, А.П. Новиков, Е.А. Екимов	
исследование фононного крыла фотолюминесценции комплекса герман	ии— 187
Баканони Под дивлонном.	
Пазерно-индушированная фрагментация жилкометаллических капель	189
СК Иедиов 4 М Камиатиов	
Простые волны в двухкомпонентном конденсате Бозе–Эйнштейна	189
ГА Ермолаев НА Саполетова СЕ Кушнир КС Напольский	
Тонкие пленки анолного оксила титана для фотонных кристаллов	190
ЧТХ Нгуен СИ Кудрящов ПА Ланилов АА Ионин РА Хмельницкий	А А Руденко
И.Н. Сараева, Д.А. Заярный	11.11. I yoonno,
Экстраординарное пропускание массивов микроотверстий в тонкой	
металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия	192
металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия Секция космических исследований и современной астрофизики	
металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия Секция космических исследований и современной астрофизики В.В. Гарамов, В.М. Семенов, О.В. Бендеров, С.В. Малашевич	192 194
металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия Секция космических исследований и современной астрофизики В.В. Гарамов, В.М. Семенов, О.В. Бендеров, С.В. Малашевич Создание лабораторного макета гетеродинного спектрометра среднего И диапазона для исследования планетных атмосфер	192 194 IK- 194
металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия Секция космических исследований и современной астрофизики В.В. Гарамов, В.М. Семенов, О.В. Бендеров, С.В. Малашевич Создание лабораторного макета гетеродинного спектрометра среднего И диапазона для исследования планетных атмосфер M. Buchenkova, A. Skalsky, A. Sadovski	192 194 IK- 194
металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия Секция космических исследований и современной астрофизики В.В. Гарамов, В.М. Семенов, О.В. Бендеров, С.В. Малашевич Создание лабораторного макета гетеродинного спектрометра среднего И диапазона для исследования планетных атмосфер M. Buchenkova, A. Skalsky, A. Sadovski Wave phenomena in the Moon environment	
металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия Секция космических исследований и современной астрофизики В.В. Гарамов, В.М. Семенов, О.В. Бендеров, С.В. Малашевич Создание лабораторного макета гетеродинного спектрометра среднего И диапазона для исследования планетных атмосфер M. Buchenkova, A. Skalsky A. Sadovski Wave phenomena in the Moon environment A.B. Черноглазов, В.С. Бескин, А.М. Киселев, Е.Е. Нохрина	192 194 IK- 194 196
металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия Секция космических исследований и современной астрофизики В.В. Гарамов, В.М. Семенов, О.В. Бендеров, С.В. Малашевич Создание лабораторного макета гетеродинного спектрометра среднего И диапазона для исследования планетных атмосфер M. Buchenkova, A. Skalsky, A. Sadovski Wave phenomena in the Moon environment A.B. Черноглазов, В.С. Бескин, А.М. Киселев, Е.Е. Нохрина Внутренняя структура релятивистских джетов, коллимированных внешни	192 194 IK- 194 196 им
металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия Секция космических исследований и современной астрофизики В.В. Гарамов, В.М. Семенов, О.В. Бендеров, С.В. Малашевич Создание лабораторного макета гетеродинного спектрометра среднего И диапазона для исследования планетных атмосфер М. Buchenkova, A. Skalsky, A. Sadovski Wave phenomena in the Moon environment A.B. Черноглазов, В.С. Бескин, А.М. Киселев, Е.Е. Нохрина Внутренняя структура релятивистских джетов, коллимированных внешни давлением	192 194 IK- 194 196 им
металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия Секция космических исследований и современной астрофизики В.В. Гарамов, В.М. Семенов, О.В. Бендеров, С.В. Малашевич Создание лабораторного макета гетеродинного спектрометра среднего И диапазона для исследования планетных атмосфер <i>М. Виchenkova, A. Skalsky, A. Sadovski</i> Wave phenomena in the Moon environment <i>А.В. Черноглазов, В.С. Бескин, А.М. Киселев, Е.Е. Нохрина</i> Внутренняя структура релятивистских джетов, коллимированных внешни давлением <i>С.А. Панафидина, Г.С. Бисноватый-Коган</i>	192 194 IK- 194 196 им
 металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия Секция космических исследований и современной астрофизики <i>B.B. Гарамов, В.М. Семенов, О.В. Бендеров, С.В. Малашевич</i> Создание лабораторного макета гетеродинного спектрометра среднего И диапазона для исследования планетных атмосфер <i>M. Buchenkova, A. Skalsky, A. Sadovski</i> Wave phenomena in the Moon environment <i>A.B. Черноглазов, В.С. Бескин, А.М. Киселев, Е.Е. Нохрина</i> Внутренняя структура релятивистских джетов, коллимированных внешни давлением <i>С.А. Панафидина, Г.С. Бисноватый-Коган</i> Исследование автомодельного решения о распространении сильной удар волиць в распространении сильной удар 	192 194 IK- 194 196 им
 металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия Секция космических исследований и современной астрофизики В.В. Гарамов, В.М. Семенов, О.В. Бендеров, С.В. Малашевич Создание лабораторного макета гетеродинного спектрометра среднего И диапазона для исследования планетных атмосфер М. Buchenkova, A. Skalsky, A. Sadovski Wave phenomena in the Moon environment	192 194 IK- 194 196 им 197 ной 198
 металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия Секция космических исследований и современной астрофизики В.В. Гарамов, В.М. Семенов, О.В. Бендеров, С.В. Малашевич Создание лабораторного макета гетеродинного спектрометра среднего И диапазона для исследования планетных атмосфер М. Buchenkova, A. Skalsky, A. Sadovski Wave phenomena in the Moon environment	192 194 IK- 194 196 им
 металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия	192
 металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия	192 194 IK- 194 196 им
 металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия	192
 металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия	
 металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия	192
 металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия	192
 металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия	
 металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия	192

		11	

Уточненные космологические ограничения, полученные с использованием новой калибровки масштаба масс скоплений галактик	,
А.В. Попков, С.Б. Попов	
Частота слияний экзопланет со звёздами, вызванных приливной эволюцией	;
Секция лазерных систем и структурированных материалов	
З.В.Бедрань, М.А. Белянчиков, Е.С. Жукова, В.Г. Томас, Е. Симчук, Б.П. Горшунов	
Терагерцовая-инфракрасная спектроскопия энергетических состояний	
подсистемы молекул H ₂ O в кристаллах кордиерита211	
В.А. Бируля, В.В.Стрелков	
Генерация высоких гармоник в интенсивных двухцветных лазерных полях	
К.М. Красиков, В.В. Глушков, С.В. Демишев, В.Н. Краснорусский, Н.Ю. Шицевалова, В.Б. Филипов, А.Л.Хорошилов, Н.Е. Случанко	
Аномальный эффект Холла в парамагнитной фазе антиферромагнетика	
$Ho_{0.8}Lu_{0.2}B_{12}215$)
С.Р. Егиян, Л.Н. Алябьева, В.И. Торгашев, Е.С. Жукова, Д.А. Винник, С.А. Гудкова, А.С. Прохоров, Б.П. Горшунов	
Терагерцовая спектроскопия монокристаллического гексагонального феррита М-типа BaTi _{0.6} Fe _{11.4} O ₁₉ 218	,
Н.Н. Скрябин, М.А. Бухарин, Д.В. Худяков	
Приповерхностная фемтосекундная запись треков с индуцированным показателем преломления в кристалле ниобата лития)
И.В. Баймлер, Е.В Бармина, А.В. Симакин, Г. А. Шафеев	
Исследование процесса лазерной генерации водорода в органических жидкостях 222	1
К.О. Айыыжы, Е.В. Бармина, Г.А. Шафеев, И.И. Раков	
Влияние внешнего магнитного поля на морфологию наночастиц золота, полученных методом лазерной абляции в жидкости	ł
Е.С. Скороходов, Т.В. Павлова, К.Н. Ельцов	
Адсорбция атома кремния на хлорированную поверхность Si(100))
М.Д. Давыдова, К.А. Звездин	
Сверхбыстрое оптическое переключение намагниченности в железо-иттриевых	
гранатах	,
А.А. Худорожков, П.Н. Скирдков, К.А. Звездин, А.Ф. Попков	
Спиновый диод с двойным антиферромагнитным закреплением)
И.В. Данилов, Е.Л. Громницкая, А.Г. Ляпин, В.В. Бражкин	
Упругие свойства 1-пропанола при высоком давлении	
А.Ю. Тихановский, В.Ю. Иванов, А.М. Кузьменко, А.М. Балбашов, А.А. Мухин	
Магнитоэлектрические явления в Fe лангаситах	,
Н.А. Фокина, В.С. Батурин, С.В. Лепешкин, Ю.А. Успенский	
Электронная структура и свойства кластеров Si _n H _{2m} с различной степенью пассивации	;
Т.Л. Бардина, С.С. Алешкина, Д.С.Липатов, М.М. Бубнов, А.Н. Гурьянов, М.Е. Лихачев	
Изучение факторов, снижающих эффективность иттербиевых волоконных лазеров и усилителей, излучающих в спектральной области около 0.98 мкм	,
В.С. Журкин, М.А. Анисимов, А.В. Богач, А.Д. Божко, А.В. Духненко, Н.Ю. Шицевалова, Н.Е. Случанко, В.В. Глушков	
Обменное взаимодействие и параметры электронной структуры в ферромагнитном полуметалле EuB6 240)

А.Р. Ляпин, Р.А. Буренин

А.В. Уваров, С.С. Гаврилов, Н.А. Гиппиус	
Переходы между бистабильными состояниями экситон-поляритонов в полупроводниковом микростолбике	243
Д.И. Ибрагимов, А.В. Семено, М.И. Гильманов, С.В. Демишев	
Электронный спиновый резонанс в твердых растворах замещения	
(Fe _{1-x} Mn _x) _{0,95} Co _{0,05} Si с сильными электронными корреляциями	245
Секция физики высоких плотностей энергии	247
А.А. Алексеевская, К.Г. Косс, К.Б. Стаценко, М.М. Васильев	
Экспериментальное изучение коэффициента диффузии в лазерно-	
индуцированном потоке плазменно-пылевого монослоя	247
Е.А. Кононов, М.М. Васильев, О.Ф. Петров	
Фазовый переход в двумерной плазменно-пылевой структуре частиц меламин- формальдегида при кинетическом нагреве лазерным излучением	248
Э.А. Саметов, О. С. Ваулина, Е.А. Лисин	
Диффузия в ограниченном ансамбле заряженных частиц в постоянном магнитном поле	248
М.А. Мальцев, И.В. Морозов, Е.Л. Осина	
Термодинамические функции нейтрального и положительного иона димера аргона	249
П.А. Карпышев, Р.Е. Болтнев, М.М. Васильев, О.Ф. Петров	
Оценка внешнего воздействия на диамагнитные частицы в статической	
магнитной ловушке при температурах ~0,1 К при отсутствии диссипации	252
А.А. Барсукова, П.Р. Левашов, Д.В. Минаков	
Исследование автомодельности свойств газа с потенциалом мягких сфер	252
В.М. Бочарников, В.В. Володин, В.В. Голуб	
О подъемной силе, возникающей при взаимодействии синтетической струи симметричного актуатора с набегающим потоком	253
Р.А. Усманов, Н.Н. Антонов, Г.Д. Лизякин, А.Д. Мельников, В.П. Полищук, И.М. Ярц	ев
Исследование эффекта термоэмиссионной вставки на параметры диффузной вакуумной дуги с оксидным катодом	254
И.А. Рябов, Е.А. Кононов, М.М. Васильев, О.Ф. Петров	
Аномально высокая зарядка дисперсных частиц в электронно-пучковой плазме	255
И.А. Мартынова, И.Л. Иосилевский, А.А. Шагайда	
Эффект нелинейного экранирования и перенормировки макрозарядов в комплексной плазме	255
Н.Н. Антонов, Р.А. Усманов, Г. Д. Лизякин, А.В. Гавриков, В.П. Смирнов, А.Д. Мелы	ников
Источник плазмы смеси веществ Pb и Ag, моделирующих компоненты отработавшего ядерного топлива, на основе несамостоятельного дугового	
разряда в магнитном поле	256
Я.А. Мурзаев, Г.Д. Лизякин, А.В. Гавриков, В.П. Смирнов	
Профиль потенциала плазмы в отражательном разряде с секционными катодами.	257
Е.А. Алексеевская, Р.Е. Болтнев	
Расчёт влияния градиента температуры вдоль стенки газоразрядной трубки на ориентацию одномерных плазменно-пылевых структур при криогенных температурах	258
С.Ю. Ананьев А.Ю. Полгобородов Б.Л. Янковский	
Источник света на основе горения смеси порошков Al+CuO	259

С.В. Брюзгин, М.М. Васильев, О.Ф. Петров	
Диагностика и применение низкотемпературной плазмы диэлектрического	
барьерного разряда, генерируемого различными источниками	
А.Д. Богданов, Е.А. Лисин, М. М. Васильев, О.Ф. Петров	
Расчет зарядово-динамических характеристик пылевых частиц для	• • •
экспериментов в околоземном космическом пространстве	
А.И. Седунов, Р.Е. Болтнев, М.М. Васильев, О.Ф. Петров	
Моделирование теплообмена в криогенном гелиевом разряде постоянного т вертикальной трубке, охлаждаемой сверхтекучим гелием	ока в 262
СА Гуртовой ЕА Кононов ММ Васильев ОФ Петров	
Молификация поверхности пылевых частиц в плазме ВЧ-разряла	
ГС Мишура НЕ Андреев	
Молелирование кильватерной волны, генерируемой ультрарелятивистским	
протонным сгустком	
В.С. Попов, Л.П. Пугачёв, Н.Е. Андреев	
Влияние самофокусировки на процессы захвата и ускорения электронов в	
плазменной волне, генерируемой субтераваттным лазерным импульсом	
Д.В. Пугачёва, Н.Е. Андреев	
Использование гибридных методов для моделирования многостадийного лазерно-плазменного ускорения	
М.А. Парамонов, Д.В. Минаков, П.Р. Левашов	
Восстановление изоэнтроп разгрузки тугоплавких металлов на основе первопринципных расчетов	
А.А. Игнатьев, Е.А. Лисин, К.Б. Стаценко, О.Ф. Петров	
Определение анизотропных сил взаимодействия между двумя пылевыми	
частицами в газовом разряде	
А.В. Шоненков, А.Д. Усачев, А.В. Зобнин, А.М. Липаев, В.И. Молотков, О.Ф. І. М.Ю. Пустыльник, М.А. Тома, Х.М. Томас	Тетров,
Спектральная диагностика пылевой плазмы в положительном столбе газово разряда низкого давления	ого 271
А.О. Белозерцев, М.М. Васильев, О.Ф. Петров	
Формирование в коллоидных системах кластеров диамагнитных макрочасти магнитных ловушках	иц в 273
И.И. Файрушин	
О моделировании процессов переноса в двумерной системе взаимодействун частиц при воздействии лазерного излучения	ощих 273
Секция проблем безопасного развития атомной энергетики	275
A B E E E E E E E E E E E E E E E E E E	
А.Б. Борисов, А.А Сорокин, Б.Б. лихинскии, И.А. Евоокимов Распетный анализ влияния факторов формоизменения топливных элементо	D
реактора ВВЭР-1000 на разновысотность твэлов и твэгов на ранних сроках эксплуатации	275
А В Ланилин А В Соловьев А М Зайшев	
Схема КАБАРЕ для численного моделирования процессов горения и детон	ации 276
ЛК Валетов ПП Каменская	
Аналитические и численные оценки теплоотлачи нилинлрических бассейно	B
металлического или оксидного расплава	

	О.О. Корчагина	
	Анализ процесса погружения тепловыделяющего шара под действием силы	
	тяжести	280
,	Д.Д. Каменская, Д.К. Валетов	
	Численное моделирование теплоотдачи расплава в устройстве локализации	202
	BBSF-1200	203
	И.С. Коноратенко, К.В. Леонов	
	присутствии деградирующего диффузионного барьера	286
Ce	екция электродинамики сложных систем и нанофотоники	289
	М.Ю. Губин, С.Н. Карпов, А.В. Прохоров	
	Формирование неклассических состояний локализованных плазмонов в	
	спазерных системах под управлением внешнего магнитного поля	289
	А.В. Шестериков, М.Г. Гладуш, А.В. Прохоров	
	Формирование суб-пикосекундных плазмон-поляритонных импульсов в	
	процессе кооперативного распада экситонов квантовых точек вблизи	
	металлической поверхности	290
	В.И. Полозов, С.С. Маклаков, С.А. Маклаков, В.А. Амеличев, А.Д. Мишин,	
	С.Н. Старостенко, В.Н. Кисель	202
	Особенности синтеза тонких пленок VO_2 для электродинамических приложении	293
	К.А. Галалаев, Б.Д. Гонанаискии, Е.Ф. Петрусевич, С.С. Маклаков, Г.В. Дуоинина, В.И Пологов, М.В. Седова	1.
	Электрофизические характеристики фотоактивных тонкоплёночных композитов	
	на основе октафенил-2,3-нафталоцианината цинка	294
	М.Л. Обухов, А.М. Лебедев	
	Подавление обратного рассеяния от металлического треугольника над зеркалом	
	путём нанесения поглощающего покрытия вдоль краёв треугольника	295
	Р.Ш. Акзянов	
	Спиновый ток в топологических изоляторах	297
	Б.Д. Тонанайский, И.А. Богинская, И.А. Рыжиков, И.Н. Курочкин, И.А. Родионов, А.С Бабурин, М.В. Седова, Н.Д. Ушаков, К.А. Талалаев	
	Анализ спектров комбинационного рассеяния белков методами машинного	
	обучения	298
,	Д.А. Хохлов, А.Л. Рахманов, А.В. Рожков	
	Рассеяние электронов на прямоугольном потенциальном барьере в нодальном	200
	полуметалле	299
	С.В. Коканова, А.В. Рожков	
	Влияние беспорядка на температуру Нееля ВаFe ₂ As ₂ легированного Ки: теоретический анализ	301
	Р.С. Пузько	
	Особенности некогерентного рассеяния на случайных неоднородностях в	204
		304
111	кола-семинар «Фундаментальные взаимодействия и космология»	.305
,	Д.М. Родкин, Ю.М. Чувильский	
	Исследование резонансных и слабосвязанных состояний легких ядер с	
	однонуклонным гало на базе первопринципов	305

Изучение отклика супермодуля PSD на тестовом протонном пучке 2-6 ГэВ/с в 307 У.А. Дмиприева, И.А. Пшеничнов 307 У.А. Дмиприева, И.А. Пшеничнов 309 Моделирование образования вторичных ядер в результате электромагнитных вааммодействий ядер свинца звальмодействий ядер свинца 389 Ph на БАК 309 А.В. Мефодьев, I.O.Г. Куденко 311 Л.В. Инжеечик, А.К. Выборов, Г.А. Коротеев, А.П. Фазлиахметов 311 Л.В. Инжеечик, А.К. Выборов, Г.А. Коротеев, А.П. Фазлиахметов 0 0 312 А.Ф. Афоник, С.В. Зуев, Е.С. Конобеевский 312 312 А.Ф. Афоник, С.В. Зуев, Е.С. Конобеевский 313 Возможность восстановления тепловой и эпитепловой частей спектра нейтронов фотонейтронного источника методом нейтронно-активационного анализа. 313 К.С. Давыдов Переход к нерелятивистскому пределу при распаде Q-шара на массивные фермионы. 314 А.С. Чудайкин Моделир с фазовым переходом и со слабо взаимодействующим скалярным полем в свете разрешения некоторых проблем космологии и астрофизики. 315 С.А. Федотова, К.А. Лукьянов 316 А.С. Костин, Ю.Г. Куденко 316 Эволюция подаризции энектрона в лазерно-плазменном ускорителе 317 Л.И. Шабанов 114 Электрона в элесперимента Enubet 316	Н.М. Карпушкин	
У.А. Дмитриева, И.А. Писепичнов Моделирование образования вторичных ядер в результате электромагнитных взаимодействий ядер свинца Ваву МИND: последние результаты тестов на пучке в ЦЕРНе 311 Л.В. Мефодьев, IO.Г. Куденко Ваby MIND: последние результаты тестов на пучке в ЦЕРНе 311 Л.В. Нижсечик, А.К. Выборов, Г.А. Коротеев, А.Н. Фазлиахиетов Оценка фона от солнечных нейтрино для экспериментов по поиску безнейтринного двойного бета-распада в ⁷⁶ Се безнейтронного источника методом нейтронно-активационного анализа	Изучение отклика супермодуля PSD на тестовом протонном пучке 2-6 ГэВ/с в ЦЕРНе	307
Моделирование образования вторичных ядер в результате электромагнитных влаимодействий ядер свинца ²⁰⁸⁸ Рb на БАК 309 А.В. Мефодьев, Ю.Г. Куденко 311 Ваby МІND: последние результаты тестов на пучке в ЦЕРНе 311 Л.В. Инжечик, А.К. Выборов, Г.А. Коротеев, А.Н. Фазлиахметов 312 Оценка фона от солнечных пейтрино для экспериментов по поиску 6езиейтринного двойного бета-распада в ⁷⁶ Ge. 312 А.Ф. Афонии, С.В. Зуев, Е.С. Конобеевский Возможность восстановления тепловой и эпитепловой частей спектра нейтронов фотопейтронного источника методом нейтронно-активационного анализа. 313 К.С. Давыдов Переход к нерелятивистскому пределу при распаде Q-шара на массивные фермионы. 314 А.С. Чудайкии Модели с фазовым переходом и со слабо взаимодействующим скалярным полем в свете разрешения некоторых проблем космологии и астрофизики. 315 С.Л. Федотов, К.А. Лукьянов Тестирование различных типов сцинтилляторов для эксперимента Enubet (CERN). 316 А.С. Костин, Ю.Г. Куденко 316 317 318 Н.О. Агасим, М.С. Лукашов, Ю.А. Симонов 318 318 318 318 И.О. Асасии, М.С. Лукашов, Ю.А. Симонов 319 312 322 318 322 323 324 324 324	У.А. Дмитриева, И.А. Пшеничнов	
А.В. Мефодьев, Ю.Г. Куденко 311 Ва ум МІND: последние результаты тестов на пучке в ЦЕРНе 311 Л.В. Инжечик, А.К. Выборов, Г.А. Коротеев, А.Н. Фазлиахиетов 0ценка фона от солнечных нейтрино для экспериментов по поиску безнейтринного двойного бета-распада в ⁷⁶ Ge 312 А.Ф. Афонин, С.В. Зуев, Е.С. Конобеевский 312 Возможность восстановления тепловой и эпитепловой частей спектра нейтронов фотонейтронного источника методом нейтронно-активационного анализа. 313 К.С. Давыдов Переход к нерелятивнстскому предлу при распаде Q-шара на массивные фермиюны 314 А.С. Чудайкин Модели с фазовым переходом и со слабо взаимодействующим скалярным полем в свете разрешения некоторых проблем космологии и астрофизики. 315 С. Чудайкин Модели с фазовым переходом и со слабо взаимодействующим скалярным полем в свете разрешения некоторых проблем космологии и астрофизики. 315 С.А. Федотов, К.А. Лукьянов Тестирование различных типов сцинтиляторов для эксперимента Enubet (ССЕКN)	Моделирование образования вторичных ядер в результате электромагнитных взаимодействий ядер свинца ²⁰⁸ Рb на БАК	309
Ваby MIND: последние результаты тестов на пучке в ЦЕРНе 311 Л.В. Инжечик, А.К. Выборов, Г.А. Коротеев, А.Н. Фазлиахметов 0ценка фона от солпечных нейтрино для экспериментов по поиску безнейтринного двойного бета-распада в ⁷⁶ Ge	А.В. Мефодьев, Ю.Г. Куденко	
Л.В. Инжечик, А.К. Выборов, Г.А. Коротеев, А.Н. Фазлиахметов Оценка фона от солнечных нейтрино для экспериментов по поиску безнейтринного двойного бета-распада в ⁷⁶ Ge	Baby MIND: последние результаты тестов на пучке в ЦЕРНе	311
Оценка фона от солнечных нейтрино для экспериментов по поиску безнейтринного двойного бета-распада в ⁷⁶ Ge	Л.В. Инжечик, А.К. Выборов, Г.А. Коротеев, А.Н. Фазлиахметов	
безнейтринного двойного бета-распада в ⁷⁶ Ge	Оценка фона от солнечных нейтрино для экспериментов по поиску	
4. Ф. Афонин, С.В. Зуев, Е.С. Конобеевский Возможность восстановления тепловой и эпитепловой частей спектра нейтронов фотонейтронного источника методом нейтронно-активационного анализа	безнейтринного двойного бета-распада в ⁷⁶ Ge	312
Возможность восстановления тепловой и эпитепловой частей спектра нейтронов фотонейтронного источника методом нейтронно-активационного анализа	А.Ф. Афонин, С.В. Зуев, Е.С. Конобеевский	
фотонейтронного источника методом нейтронно-активационного анализа	Возможность восстановления тепловой и эпитепловой частей спектра нейтронов	
К.С. Давыдов Переход к нерелятивистскому пределу при распаде Q-шара на массивные фермионы	фотонейтронного источника методом нейтронно-активационного анализа	313
Переход к нерелятивистскому пределу при распаде Q-шара на массивные 314 А.С. Чудайкин 314 Модели с фазовым переходом и со слабо взаимодействующим скалярным полем в свете разрешения некоторых проблем космологии и астрофизики	К.С. Давыдов	
фермионы 314 А.С. Чудайкин Модели с фазовым переходом и со слабо взаимодействующим скалярным полем в свете разрешения некоторых проблем космологии и астрофизики. 315 С.А. Федотов, К.А. Лукьянов 315 Тестирование различных типов сцинтилляторов для эксперимента Enubet 316 (CERN). 316 А.С. Костии, Ю.Г. Куденко 316 Эволюция поляризации электрона в лазерно-плазменном ускорителе 317 А.И. Шабанов Резонанс Ропера в дифракционных исследованиях в эксперименте ALICE на Большом адронном коллайдере 318 Н.О. Агасян, М.С. Лукашов, Ю.А. Симонов 319 Поляковские петли в динамике горячей КХД 319 Скция «ИТЭР – шаг в энергетику будущего» . 322 А.А. Гразунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов Изготовление и испытания упрощённых квалификационных макетов панели 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 8. В. Паршутин, А.Ю. Лешуков, М.Н Свириденко, С.Н. Томилов, А.В. Размеров 322 А.Н. Зайцев Влияние сдвиговых напряжений на работоспособность плазменного покрытия 323 Г.М. Асадулин, Е.Н. Андреенко, А.В. Горшков 323 323 Г.М. Асадулей, Бланкета ИТЭР 323 323 Г.М. Асадулин, Е	Переход к нерелятивистскому пределу при распаде Q-шара на массивные	214
А.С. чуданкин Модели с фазовым переходом и со слабо взаимодействующим скалярным полем в свете разрешения некоторых проблем космологии и астрофизики	фермионы	
 Модели с фазовым переходом и со слабо взаимоденствующим скалярным полем в свете разрешения некоторых проблем космологии и астрофизики	А.С. Чудаикин	
С.А. Федотов, К.А. Лукьянов Тестирование различных типов сцинтилляторов для эксперимента Enubet (CERN)	Модели с фазовым переходом и со слабо взаимодеиствующим скалярным полем	315
С.А. Фесолюв, К.А. Луквнов Тестирование различных типов сцинтилляторов для эксперимента Enubet (CERN)	С 4. Федотов, К. 4. Призацов	
ССЕПО	С.А. Феоотов, К.А. Луколнов	
А.С. Костин, Ю.Г. Куденко Эволюция поляризации электрона в лазерно-плазменном ускорителе 317 А.И. Шабанов Резонанс Ропера в дифракционных исследованиях в эксперименте ALICE на Большом адронном коллайдере 318 Н.О. Агасян, М.С. Лукашов, Ю.А. Симонов 319 поляковские петли в динамике горячей КХД 319 екция «ИТЭР – шаг в энергетику будущего» 322 А.А. Герваш, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов Изготовление и испытания упрощённых квалификационных макетов панели первой стенки ИТЭР 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, Е.В. Париутин, А.Ю. Лешуков, М.Н Свириденко, С.Н. Томилов, А.В. Размеров 322 А.Н. Зайцев Влияние сдвиговых напряжений на работоспособность плазменного покрытия Al ₂ O ₃ опорных элементов систем крепления модулей бланкета ИТЭР 323 Г.М. Асадулин, Е.Н. Андреенко, А.В. Горшков Макетирование оптического тракта диагностики спектроскопии водородных линий для установки ITER 325 В.Е. Кузнецов, Р.В. Рулёв Проведение испытаний макетов первой стенки ИТЭР для изучения влияния 325	(CERN)	316
Эволюция поляризации электрона в лазерно-плазменном ускорителе 317 А.И. Шабанов Резонанс Ропера в дифракционных исследованиях в эксперименте ALICE на Большом адронном коллайдере 318 Н.О. Агасян, М.С. Лукашов, Ю.А. Симонов 319 скция «ИТЭР – шаг в энергетику будущего» 322 А.А. Герваш, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов 322 А.А. Герваш, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов 322 А.А. Герваш, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов 322 А.А. Герваш, Д.А. Глазунов, П.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 322 А.В. Таршутин, А.Ю. Лешуков, М.Н Свириденко, С.Н. Томилов, А.В. Размеров 322 А.Н. Зайцев 322 Влияние сдвиговых напряжений на работоспособность плазменного покрытия 323 Г.М. Асадулин, Е.Н. Андреенко, А.В. Горшков 323 Макетирование оптического тракта диагностики спектроскопии водородных 325 В.Е. Ку	А.С. Костин. Ю.Г. Куденко	
А.И. Шабанов Резонанс Ропера в дифракционных исследованиях в эксперименте ALICE на Большом адронном коллайдере 318 <i>Н.О. Агасян, М.С. Лукашов, Ю.А. Симонов</i> 319 Поляковские петли в динамике горячей КХД 319 екция «ИТЭР – шаг в энергетику будущего» 322 <i>А.А. Герваш, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов</i> 322 <i>А.А. Герваш, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов</i> 322 <i>А.А. Гервац, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов</i> 322 <i>А.А. Гервац, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов</i> 322 <i>А.А. Гервац, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов</i> 322 <i>А.А. Гервац, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов</i> 322 <i>А.А. Гервац, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов</i> 322 <i>А.А. Гервац, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов</i> 322 <i>А.А. Гервац, Д.А. Глазунов, М.Н.Свириденко, С.Н. Томилов, А.В. Размеров</i> 322 <i>А.В. Париутин, А.Ю. Лешуков, М.Н Свириденко, С.Н. Томилов, А.В. Размеров</i> 322 <i>Комплексные</i> испытания элементов конструкции панелей первых стенок и 322 <i>А.Н. Зайцев</i> 324 322 Влияние сдвиговых напряжений на работоспособность плазменного покрытия 323 <i>Г.М. Асадулин, Е.Н. Андреенко, А.В. Горшк</i>	Эволюция поляризации электрона в лазерно-плазменном ускорителе	317
Резонанс Ропера в дифракционных исследованиях в эксперименте ALICE на Большом адронном коллайдере	А.И. Шабанов	
Большом адронном коллайдере 318 Н.О. Агасян, М.С. Лукашов, Ю.А. Симонов 319 Поляковские петли в динамике горячей КХД 319 екция «ИТЭР – шаг в энергетику будущего» 322 А.А. Герваш, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов 322 Изготовление и испытания упрощённых квалификационных макетов панели 322 А.А. Герваш, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов 322 ИЗготовление и испытания упрощённых квалификационных макетов панели 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, М.Н Свириденко, С.Н. Томилов, А.В. Размеров 322 Комплексные испытания элементов конструкции панелей первых стенок и 322 А.Н. Зайцев 322 Влияние сдвиговых напряжений на работоспособность плазменного покрытия 323 Г.М. Асадулин, Е.Н. Андреенко, А.В. Горшков 323 Г.М. Асадулин, Е.Н. Андреенко, А.В. Горшков 325 В.Е. Кузнецов, Р.В. Рулёв 325 В.Е. Кузнецов, Р.В. Рулёв 325 Проведение испытаний макетов первой стенки ИТЭР для изучения влияния	Резонанс Ропера в дифракционных исследованиях в эксперименте ALICE на	
 Н.О. Агасян, М.С. Лукашов, Ю.А. Симонов Поляковские петли в динамике горячей КХД	Большом адронном коллайдере	318
Поляковские петли в динамике горячей КХД 319 екция «ИТЭР – шаг в энергетику будущего» 322 А.А. Герваш, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов 322 Изготовление и испытания упрощённых квалификационных макетов панели 322 первой стенки ИТЭР 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 322 А.В. Парицутин, А.Ю. Лешуков, М.Н Свириденко, С.Н. Томилов, А.В. Размеров Комплексные испытания элементов конструкции панелей первых стенок и соединителей модулей бланкета ИТЭР 322 А.Н. Зайцев Влияние сдвиговых напряжений на работоспособность плазменного покрытия Al ₂ O ₃ опорных элементов систем крепления модулей бланкета ИТЭР 323 Г.М. Асадулин, Е.Н. Андреенко, А.В. Горшков 325 Макетирование оптического тракта диагностики спектроскопии водородных линий для установки ITER 325 B.E. Кузнецов, Р.В. Рулёв Проведение испытаний макетов первой стенки ИТЭР для изучения влияния	Н.О. Агасян, М.С. Лукашов, Ю.А. Симонов	
ЗЗ22 А.А. Гразунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов Изготовление и испытания упрощённых квалификационных макетов панели первой стенки ИТЭР 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, 322 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, М.Н Свириденко, С.Н. Томилов, А.В. Размеров 8 Комплексные испытания элементов конструкции панелей первых стенок и 322 <i>соединителей модулей бланкета ИТЭР</i> 322 <i>А.Н. Зайцев</i> 8 8 Влияние сдвиговых напряжений на работоспособность плазменного покрытия 323 <i>Г.М. Асадулин, Е.Н. Андреенко, А.В. Горшков</i> 323 Г.М. Асадулин, Е.Н. Андреенко, А.В. Горшков 325 В.Е. Кузнецов, Р.В. Рулёв 325 В.Е. Кузнецов, Р.В. Рулёв 325 Проведение испытаний макетов первой стенки ИТЭР для изучения влияния	Поляковские петли в динамике горячей КХД	319
 А.А. Герваш, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов Изготовление и испытания упрощённых квалификационных макетов панели первой стенки ИТЭР	Секция «ИТЭР – шаг в энергетику будущего»	322
 Изготовление и испытания упрощённых квалификационных макетов панели первой стенки ИТЭР	А А Гереан Л.А. Глазунов П.Ю. Пискарёв В.В. Рузанов	
 первой стенки ИТЭР	Изготовление и испытания упрошённых квалификационных макетов панели	
 А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, Е.В. Паршутин, А.Ю. Лешуков, М.Н Свириденко, С.Н. Томилов, А.В. Размеров Комплексные испытания элементов конструкции панелей первых стенок и соединителей модулей бланкета ИТЭР	первой стенки ИТЭР	322
 Е.В. Паршутин, А.Ю. Лешуков, М.Н Свириденко, С.Н. Томилов, А.В. Размеров Комплексные испытания элементов конструкции панелей первых стенок и соединителей модулей бланкета ИТЭР	А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов,	
Комплексные испытания элементов конструкции панелей первых стенок и соединителей модулей бланкета ИТЭР	Е.В. Паршутин, А.Ю. Лешуков, М.Н Свириденко, С.Н. Томилов, А.В. Размеров	
 А.Н. Зайцев Влияние сдвиговых напряжений на работоспособность плазменного покрытия Al₂O₃ опорных элементов систем крепления модулей бланкета ИТЭР	Комплексные испытания элементов конструкции панелей первых стенок и соединителей модулей бланкета ИТЭР	322
Влияние сдвиговых напряжений на работоспособность плазменного покрытия Al ₂ O ₃ опорных элементов систем крепления модулей бланкета ИТЭР	А.Н. Зайцев	
 Г.М. Асадулин, Е.Н. Андреенко, А.В. Горшков Макетирование оптического тракта диагностики спектроскопии водородных линий для установки ITER	Влияние сдвиговых напряжений на работоспособность плазменного покрытия Al ₂ O ₃ опорных элементов систем крепления модулей бланкета ИТЭР	323
Макетирование оптического тракта диагностики спектроскопии водородных линий для установки ITER	Г.М. Асадулин, Е.Н. Андреенко, А.В. Горшков	
В.Е. Кузнецов, Р.В. Рулёв Проведение испытаний макетов первой стенки ИТЭР для изучения влияния	Макетирование оптического тракта диагностики спектроскопии водородных линий для установки ITER	325
Проведение испытаний макетов первой стенки ИТЭР для изучения влияния	В.Е. Кузнецов, Р.В. Рулёв	
	Проведение испытаний макетов первой стенки ИТЭР для изучения влияния	
тепловой нагрузки, приложенной к боковым граням плиток облицовки	тепловой нагрузки, приложенной к боковым граням плиток облицовки	326

В.Е. Кузнецов, А.В. Володин, А.И. Кокоулин, Б.Н. Степанов, А.С. Малышев	
Эксперименты по обнаружению кризиса теплопередачи в макетах внутренних вертикальных мишеней дивертора ITER	326
А.Д. Ярошевская, Д.В. Коваленко, Н.С. Климов, В.Л. Подковыров	
Применение квазистационарного плазменного ускорителя КСПУ-Т для моделирования вспышек излучения, характерных для ослабленного срыва ИТЭР.	327
М.А Ларченко, И.М. Позняк	
Исследование продуктов эрозии при облучении вольфрама, стали и алюминия интенсивными потоками плазмы	328
А.Ю. Шабашов	
Исследование характеристик спектрометрического оборудования, созданного для диагностической системы «Активная спектроскопия ИТЭР»	330
И.М. Позняк, В.М. Сафронов, В.Ю. Цыбенко	
Исследование течения расплавленного слоя металла при условиях, которые характерны для быстрых плазменных процессов в ИТЭР	332
Д.А. Кумпилов	
Радиометр гамма-излучения на основе синтетического алмаза	334
В.А. Попов, А.С. Аракчеев, А.А. Васильев, Л.Н. Вячеславов	
Моделирование плавления и образования капель вольфрама при нагреве импульсным электронным пучком	336
Л.Б. Беграмбеков, А.С. Каплевский, С.С. Довганюк, А.Е. Евсин	
Захват и десорбция водорода из вольфрама с пленками оксидов бериллия/алюминия при облучении плазмой	336
И.С. Образцов, М.М. Соколов	
Построение АСУ системы вакуумной откачки токамака на примере термоядерной установки Т–15МД	339
М.В. Чуканов, М.М. Соколов	
Архитектура информационных сетей экспериментальных термоядерных установок на примере токамака Т-15МД	341
Л.Б. Беграмбеков, А.В. Грунин, Н.А. Пунтаков	
Экспериментальный стенд тестирования материалов потоками ионов высокой плотности мощности	343
Л.Б. Беграмбеков, А.Н. Войтюк, А.М. Захаров, О.А. Бидлевич	
Модель электростатического зонда для сбора вольфрамовой пыли в ITER	345

16

Программный комитет конференции

Н.Н. Кудрявцев, ректор МФТИ – председатель В.А. Баган, директор по развитию – заместитель председателя А.А. Воронов, проректор по учебной работе и довузовской подготовке А.В. Дворкович, директор ФРКТ В.В. Киселев, директор ФРКТ В.В. Киселев, директор ФФПФ С.С. Негодяев, директор ФАКТ В.В. Иванов, директор ФЭФМ А.М. Райгородский, директор ФПМИ С.В. Леонов, директор ФБМФ П.К. Кашкаров, директор ИНБИКСТ

Организационный комитет конференции

М.В. Милов, руководитель направления «Образование» ЦУП – председатель

С.О. Русскин, представитель ФРКТ Е.Ю. Чиркина, представитель ФФПФ Ю.О. Алексеева, представитель ФАКТ В.Б. Макарова, представитель ФАКТ В.А. Яворский, представитель ФЭФМ С.А. Зайцев, представитель ФЭФМ Е.Г. Молчанов, представитель ФПМИ В.Н. Логинов, представитель ФПМИ К.А. Коньков, представитель ФПМИ К.И. Агладзе, представитель ФБМФ В.Г. Орлов, представитель ИНБИКСТ М.В. Костелева, представитель УНЦ ГСН А.С. Гупаисова, начальник пресс-службы Е.Д. Жебрак, директор аналитического центра

Секция общей физики

УДК 533.9.01

О возможности создания сверхмощного импульсного источника характеристического рентгеновского излучения на основе компактного ускорителя тяжёлых ионов в магнитном поле, сжимаемом газовым лайнером

А.С. Дзарахохова¹, Н.П. Зарецкий², А.В. Максимычев¹, Л.И. Меньшиков^{1,2}, П.Л. Меньшиков²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В данном проекте предлагается создать сверхмощный импульсный источник характеристического рентгеновского излучения с параметрами:

- энергия квантов — 0,1–2,0 КэВ,

- длительность импульса — 10–100 нс,

- энергия рентгеновского излучения в импульсе — до 10 МДж,

- доля энергии квантов К-серии ~ 50%,

- КПД «от розетки» ~10% (то есть доля энергии рентгена от потребляемой электрической энергии). По величине КПД предлагаемого источника более чем на порядок превосходит таковой для источников традиционной схемы.

Источник традиционной схемы был предложен академиком В.П. Смирновым. Импульсная цилиндрическая ксеноновая струя (газовый лайнер) пробивается электрическим импульсом и превращается в плазменный цилиндр, сжимающийся к оси под действием протекающего по нему тока масштаба нескольких мегаампер. Далее он ударяется о внутренний коаксиальный лайнер. Его кинетическая энергия переходит в тепловую и некоторая её часть уносится тепловыми рентгеновскими квантами. Эта схема характеризуется невысоким КПД из-за необходимости нагрева вещества лайнеров. Подобные опыты проводились и проводятся на отечественных генераторах электрических импульсов сверхвысокой электрической мощности (Ангара-5-1, C-300,).

В работе [1] был предложен мощный компактный импульсный ускоритель ионов на энергию 1 ГэВ. Опыты по его созданию были намечены на начало 1990-х, но по известным причинам не состоялись. Под действием магнитного поля, сжимаемого газовым лайнером, предполагалось сжать и одновременно в возникающем индукционном электрическом поле ускорить ионное кольцо, предварительно созданное внутри лайнера с использованием магнитной конфигурации со схемой «касп», когда поля двух коаксиальных соленоидов направлены навстречу друг другу.

Предполагаемые приложения ускорителя.

I. Создание инжектора для ускорителя У-70 ИФВЭ с целью выведения этой установки на мировой уровень.

II. Создание инжектора для $\mu^+\mu^-$ -коллайдера.

III. Создание мощного импульсного источника нейтрино.

IV. Создание мощного импульсного источника нейтронов.

V. Наработка трития с использованием импульсного нейтронного источника.

VI. Подпитка жидкосолевого реактора-пережигателя трансурановых элементов при замыкании ядерного топливного цикла:

а) по трёхкомпонентной схеме,

б) по двухкомпонентной схеме.

VII. Создание сверхмощного источника рентгеновских лучей (СВИРЛ).

По общему признанию из этих приложений наиболее реально осуществимым является последнее — СВИРЛ. Ключевой проблемой в создании СВИРЛ является

устойчивость ионного кольца в процессе его создания и ускорения. Неустойчивости вызваны как взаимодействием ускоряемых ионов друг с другом (т.н. бетатронная неустойчивость), так и с электронами, которые компенсируют ионное кольцо по заряду. В данном докладе показано, что взаимодействие ионов с электронами не влияет на устойчивость.

Литература

1. *Меньшиков Л.И., Недосеев С.Л., Смирнов В.П., Сомов Л.Н.* Возможность ускорения заряженных частиц в сжимающихся плазменных лайнерах: препринт / ИАЭ-5077/6. М., 1990; Атомная энергия. 71(6), 511 (1991).

УДК 004.942

Электронные лавины в грозовом облаке

Е.М. Стадничук

Институт ядерных исследований РАН

В грозовых облаках экспериментально наблюдаются гамма-вспышки. Их называют terrestrial gamma-ray flashes, или сокращённо TGF. Первым объяснил это явление Гуревич [1], предположив, что космические лучи, ускоряясь в электрическом поле внутри облака, за счёт тормозного излучения порождают гамма-излучение. Но в модели Гуревича не хватило частиц, чтобы полностью описать явление. В 2003 году Джозеф Дваер опубликовал статью, в которой описал механизм обратной связи, за счёт которого количество частиц должно многократно возрасти [2].

В качестве подтверждения своей гипотезы Дваером было проведено следующее моделирование: в центр цилиндрической области размерами 200 метров в диаметре и 200 метров в высоту с однородным электрическим полем 1 МВ/м, заполненной воздухом при нормальных условиях, попадает электрон с энергией несколько МэВ, скорость которого противоположно направлена полю. При прохождении сквозь цилиндр электрон образует геэлектрон-позитронные пары внутри объёма цилиндра. Рождённые таким образом позитроны ускоряются полем в обратную сторону и образуют вверху цилиндра новые энергичные электроны, которые затем разворачиваются в поле и образуют новые лавины.

Недостатком данной модели усиления лавины является то, что реальное поле в грозовых облаках на порядок меньше, из-за чего позитронный механизм обратной связи в реальных условиях слишком слабый, что показано в данной работе. Также был рассчитан коэффициент обратной связи, то есть среднее количество вторичных лавин на первичный электрон. Сделано это было в несколько этапов:

- 1. Было получено распределение выхода позитронов на один первичный электрон.
- 2. Используя полученное распределение, был рассчитан спектр электронов, образованных позитронами.
- 3. Из спектра электронов были отобраны такие электроны, которые способны образовать вторичную электронную лавину.

Первые два пункта были выполнены с помощью моделирования в Geant4. Первичные электроны с энергией 1 МэВ попадали в область с однородным электрическим полем 150 кВ/м размерами 200 × 200 × 400 метров. Было получено распределение позитронов по энергиям и по углу относительно оси *Z*. При выполнении второго пункта позитроны генерировались согласно этим распределениям. Они порождали электроны, распределение которых по энергиям и углу также посчитано.

В рамках третьего пункта была рассмотрена задача о развороте электрона в электрическом поле. Получена зависимость минимального угла вектора скорости электрона относительно оси Z, при котором электрон сможет развернуться в воздухе на высоте облаков под действием электрического поля, направленного вдоль оси Z, от начальной энергии электрона. Таким образом, электроны, способные породить вторичную лавину, отсеивались по углу, по энергии и по месту их рождения в цилиндре.



Рис. 1. Симуляция Дваера, представленная в его статье 2003 года [2]

- Lev I. Dornman. Cosmic rays in the earth's atmosphere and underground // Springer Science+Business Media New York. 2004. : 521–540
- Dwyer, Joseph R. A fundamental limit on electric fields in air // Geophysical Research Letters. 2003. 1–4.

УДК 543.429.23

Изучение мицеллообразования плюроника F68 в водных растворах

Е.С. Буракова¹, Н.С. Шубина¹, А.М. Перепухов¹, А.В. Максимычев¹, В.М. Негримовский²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Московский научно-исследовательский онкологический институт им. П.А. Герцена

Солюбилизация гидрофобных соединений является актуальной задачей в различных сферах человеческой деятельности и приобретает особенную значимость в области разработки лекарственных препаратов, где вещества, показавшие эффективность и безопасность в испытаниях, могут оказаться непригодными для использования на практике из-за слишком высокой гидрофобности. Для солюбилизации нерастворимых соединений в воде используются поверхностно-активные вещества, и особенности их агрегации необходимо учитывать при разработке лекарственных форм.

В данной работе изучено агрегационное поведение полимерного нПАВ плюроника F68 (рис. 1) (далее – F68), вызывающее разночтения в литературе. Авторы, использовавшие в своей работе такие методы, как ЯМР-спектроскопия, тензометрия (измерение поверхностного натяжения) или некоторые другие показывают, что мицеллообразование этого полимера происходит в диапазоне высоких концентраций и температур (например, критическая концентрация мицеллообразования – ККМ – составила 1% при 50 °C [1] и 10% при 25 °C [2]), тогда как авторами, использующими метод флюоресцентной метки [3], переход зафиксирован в области 0,4%, 37 °C). Мы применили комплексный подход в изучении агрегационного поведения F68 с использованием ЯМР-спектроскопии, динамического светорассеяния, UV-Vis спектроскопии и вискозиметрии.

Методом протонной спектроскопии ЯМР обнаружено, что агрегация F68 вызывает изменения в протонных спектрах ЯМР, а именно разделения сигнала CH₂-протонов, принадлежащих центральному блоку, на две компоненты. Это явление может быть объяснено конформационными изменениями полипропиленоксидной цепи с *гош*- на *анти*-, происходящими при разрыве водородных связей с молекулами воды, что подтверждено также с помощью ИК-спектроскопии [4]. В работе [1] это явление интерпретировано как мицеллообразование. Увеличение концентрации полимера оказывает такой же эффект. Нами обнаружено с помощью ЯМР-спектроскопии, что при 25 °С мицеллобразование плюроника F68 (возникновение нового сигнала) начинается при ~ 20% и солюбилизация гидрофобного красителя не влияет на конформационные изменения плюроника [5]. При дальнейшем увеличении температуруры/концентации происходит образование объёмно-связанной фазы, что также можно наблюдать посредством спектроскопии ¹Н-ЯМР по расщеплению пиков CH₂-протонов крайних блоков и остаточных протонов тяжёлой воды [5].

Метод вискозиметрии также указал на изменения структуры раствора при высокой концентрации (диапазон изменений концентрационной зависимости логарифма вязкости – 11–14% при 25 °C).

Методом электронной UV-Vis-спектроскопии обнаружено, что метка незначительно солюбилизируется при концентрациях плюроника ниже 0,1%, и её коллоидная растворимость (максимальная достижимая концентрация в коллоидном растворе) резко возрастает при концентрации плюроника 0,5–1%. Эта величина соотносится со значением ККМ, измеренной методом солюбилизации пирена – 0,4–0,8% [3].

Метод динамического светорассеяния показал, что изменение размера частиц наноэмульсии плюроника происходит в диапазоне высоких концентраций и температур (для 5% температура перехода составляет 50 °C, для 0,5% – 56 °C), агрегаты увеличиваются в радиусе с 5 до 15 нм. При низких концентрациях и температурах изменения размеров частиц не зафиксировано.

Так, различные физико-химические методы анализа позволяют обнаружить изменения свойств наноэмульсии в двух различных концентрационных диапазонах. Мы полагаем, что это свидетельствует о двустадийности агрегации молекул плюроника (рис. 2).



Рис. 1. Структурная формула плюроника F68



Рис. 2. Схема фазовых состояний плюроника F68 в водных растворах

- 1. *Ma J.* [*et al.*]. ¹H-NMR Spectroscopic Investigations on the Micellization and Gelation of PEO-PPO-PEO Block Copolymers in Aqueous Solutions // Langmuir. 2007. V. 23. P. 9596 – 9605.
- Kabanov A.V. [et al.]. Micelle Formation and Solubilization of Fluorescent Probes in Poly(oxyethyleneb-oxypropylene-b-oxyethylene) Solutions // Macromolecules. 1995. V. 28. N 7. P. 2303 – 2314.
- Kozlov M.Yu. [et al.]. Relationship between Pluronic block copolymer structure, critical micellization concentration and partitioning coefficients of low molecular mass solute // Macromolecules. 2000.
 V. 33. P. 3305 – 3313.
- 4. *Guo C.* [*et al.*]. Conformational structure of triblock copolymers by FT-Raman and FTIR spectroscopy // Colloid Polym. Sci. 1999. V. 277. P. 376 381.
- Babicheva E.S., Shubina N.S., Perepukhov A.M., Maximychev A.V., Negrimovsky V.M. Study of nanoemulsions of the hydrophobic phthalocyanine in pluronic aqueous solutions // Materials of 13th International Youth School-Conference Spinus 2016 «Magnetic resonance and its applications». 2016. P. 72 – 74.

УДК 539.1.05

Обработка данных тестирования прототипа электромагнитного калориметра LumiCal

Е.О. Луценко

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Будущие электрон-позитронные коллайдеры TeB-го диапазона (ILC, CLIC) призваны обеспечить доступ к возможным процессам физики за пределами стандартной модели, либо подтвердить её достоверность. В настоящее время детектирующие составляющие вышеуказанных коллайдеров находятся на стадии тестирования прототипов. Одним из детекторов является LumiCal. Это электромагнитный сегментированный Si-W колориметр в малых углах. Тестирование первых прототипов началось в 2014 году. Оно проводится ежегодно для получения оптимальной геометрии, сегментации, детектирующего объёма, калибровки отклика.

В настоящей работе будет описана обработка данных, полученных в ходе тестового облучения низкоэнергетичными пучками в 2016 году (BeamTest 2016). Стандартный метод обработки данных предполагает параметризацию сигнала. Авторами данной работы предложен альтернативный метод определения и обработки сигнала, связанный с зависимостью амплитуды сигнала и его интеграла по времени. В данный момент метод находится на стадии сравнения с фитированием – определением корреляции 2-х методов и разрешающей способности первого. Если он подтвердит предположения, то это даст существенный толчок в оптимизацию процесса обработки и реконструкции сигнала для тестирования детекторов данного типа.

На рис. 1 приведён пример сигнала для определённого канала детектора. Между интегралом и суммой от максимальных значений есть зависимость. Конечным результатом данной работы является нахождение, оценки разрешения, исследование зависимости интеграла и суммы от амплитуды.

APV 6 and Ch 17



Рис. 1. Пример сигнала (с суммой и амплитудой) и фита (с интегралом и амплитудой)

Литература

- 1. *Firlej, M (AGH-UST) [et al.*]. Development of front-end electronics for LumiCal detector in CMOS 130 nm technology // 2015. JINST: 10. N. C01018.
- 2. S.Kulis [et al.]. Test beam studies of the LumiCal prototype // Eudet-Memo. 2010. 09.
- 3. *Szymon Kulis*. Development of prototype luminosity detector modules for future experiments on linear colliders. Doctoral dissertation, Cracow: 2012.

УДК 543.429.23

Определение строения гиперразветвленного полиэфира BOLTORN методом ЯМР-спектроскопии

В.А. Шпотя¹, А.М. Перепухов¹, А.В. Максимычев¹, В.И. Гомзяк², С.Н. Чвалун²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Московский технологический университет

В последние годы внимание многих исследовательских коллективов привлекает синтез и исследование свойств макромолекул сложной архитектуры: полимерных щеток, звездообразных, гребнеобразных и др. Особый интерес вызывают дендримеры и их менее регулярные аналоги – гиперразветвленные полимеры, имеющие большое количество периферийных функциональных групп, которые можно модифицировать с целью адаптации базовой макромолекулы под конкретную научную или технологическую задачу. Благодаря возможности варьирования физических и химических свойств, такие макромолекулы могут служить универсальной платформой для транспортировки веществ различной природы, в частности, в качестве наноконтейнеров для адресной доставки лекарственных веществ.

В данной работе методом ЯМР-спектроскопии изучаются свойства гиперразветвленного полиэфира 2.2-бис(метилол)пропионовой кислоты (полиэфир BOLTORN). В структуре полиэфира BOLTORN повторяющиеся звенья делятся на три типа: терминальные (или концевые, Т), линейные (L) и дендридные (разветвляющиеся, D). В спектрах ¹Н-ЯМР значения химических сдвигов для звеньев различных типов отличаются. На рис. 1 приведён полный ¹Н-ЯМР спектр полиэфира BOLTORN, и участок спектра, соответствующий протонам CH₃-группы.

В ранее опубликованных статьях, посвящённых изучению структуры полиэфира BOLTORN методом ЯМР-спектроскопии, присутствуют разногласия в отнесении различных типов групп с сигналами в спектре ¹Н-ЯМР полимера BOLTORN [1, 2]. В данной работе удалось определить точное соответствие, которое отображено на рис. 1.

В табл. 1 приведены данные о сигналах в ¹Н-ЯМР спектре полиэфира BOLTORN – их положения, интегралы и группы в структуре молекулы полимера, которым они соответствуют. В последней колонке приводятся значения интегралов, рассчитанных в предположении о соответствии первых трёх пиков сигналам от протонов метильных групп – дендридных, линейных и терминальных (в порядке очерёдности).

Таким образом, в данной работе получено отнесение пиков в спектре ¹H-ЯМР полиэфира BOLTORN с ядрами ¹Н в молекулы полимера. По полученным данным были определены доли звеньев линейного, дендридного и терминального типов: 53%, 31% и 16% соответственно.



Рис. 1. Различные типы звеньев полиэфира BOLTORN и участок ¹Н-ЯМР-спектра полиэфира BOLTORN, характеризующий их

Таблица 1

Положения сигналов, их интегралы и соответствующие группы в ¹Н-ЯМР спектре полиэфира BOLTORN (в группах черным цветом выделен протон, дающий соответствующий сигнал)

N⁰	Положение пика, м.д.	Предполагаемая группа	Интеграл I	Рассчитанный интеграл
1	0,910,99	CH ₃ -(D)	45,94	-
2	0,991,08	CH ₃ -(L)	78,46	-
3	1,081,23	CH ₃ -(T)	24,34	-
4	3,333,53	CH ₂ -OR	115,06	113,56

5	3,954,21	CH ₂ -OH	89,36	84,76
6	4,484,68	OH-(T)	19,92	16,23
7	4,774,99	OH-(L)	25,38	26,15

 Karataeva F.Kh., Rezepova M.V., Kutyreva M.P., Kutyrev G.A., Ulakhovich N.A. Structure of Hyper-Branched Polyester Polyol BOLTORN H2O–COOH. NMR Data // Jhurnal Obshchei Khimii. 2010. V. 80. N. 9. P. 1513–1517.

2. Zagar Ema, Zigon Majda, Podzimek Stepan Characterization of commercial aliphatic hyperbranched polyesters // Polymer. 2006. 47. P. 166–175.

УДК 543.429.23

Изучение фотоизомеризации AzoTAB и СТАВ при взаимодействии с кардиомиоцитами методами ЯМР

Н.С. Шубина, Е.С. Буракова, А.М. Перепухов, А.В. Максимычев, Ш.Р. Фролова, К.И. Агладзе

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Фоторегуляторы возбудимости кардиомиоцитов СТАВ и AzoTAB вступают в реакцию фотоизомеризации. Е-изомеры встраиваются в липидный бислой, что может быть использовано для лечения аритмии [1]. СТАВ и AzoTAB способны модулировать работу потенциал-зависимых ионных каналов кардиомиоцитов [2, 3].

Фоторегуляция достигается путем УФ-облучения (365 нм). Изомеризация происходит по двойным связям в азобензоловом и стильбеновом фрагменте соответственно (рис. 1). В данной работе встраивание молекул АzoTAB и СТАВ в клеточную мембрану неонатальных кардиомиоцитов изучено методами спектроскопии ЯМР.

Методами спектроскопии ЯМР установлено, что УФ-облучение производного азобензола AzoTAB вызывает обратимую E-Z фотоизомеризацию. Обратная темновая реакция описывается кинетикой первого порядка с константой скорости К = $3 \cdot 10^{-5}$ с⁻¹. Показано, что УФ-облучение производного стильбена СТАВ сопровождается необратимой E-Z фотоизомеризацией в отличие от AzoTAB.

Ограничение молекулярной подвижности при смешении кардиомиоцитов и Е-АzoTAB приводит к уширению сигналов в ¹H-ЯМР спектре, что показывает на встраивание Е-АzoTAB в клеточную мембрану кардиомиоцитов. Е-Z фотоизомеризация приводит к нарушению взаимодействия между молекулами AzoTAB и клеточной мембраной, что наблюдается как значительное сужение сигналов в спектре смеси AzoTAB и клеток. Анализ спектров ¹H-ЯМР AzoTAB и СТАВ показывает, что СТАВ отличен по свойствам от AzoTAB. Сигналы в спектрах уширяются при встраивании Е-СТАВ в клеточную мембрану. В отличие от AzoTAB после УФ-облучения взаимодействие не нарушается и сигналы Z-СТАВ тоже уширены.

Таким образом, методами спектроскопии ЯМР высокого разрешения было показано, что AzoTAB и CTAB встраиваются в клеточную мембрану, что соответствует результатам, полученным в экспериментах с липидным бислоем. Кроме того, при добавлении к клеткам Z-CTAB встраивание тоже имеет место. Этот факт позволяет сделать вывод о том, что способность AzoTAB и CTAB модулировать работу потенциал-зависимых ионных каналов кардиомиоцитов не связана с образованием ковалентных связей при УФоблучении.



Рис. 1. Реакция фотоизомеризации АzoTAB (X = N) и CTAB (X = C)

- 1. *Abbas A*. Cardioprotective effect of resveratrol analogue isorhapontigenin versus omega-3 fatty acids in isoproterenol-induced myocardial infarction in rats // J. Physiol Biochem. 2016. V. 72(3).
- 2. *Magome N* [*et al.*]. Photo-control of excitation waves in cardiomyocyte tissue culture // Tissue Eng Part A. 2011. V. 17 I. P. 21–22.
- Frolova S.R [et al.]. Photocontrol of Voltage-Gated Ion ChannelActivity by AzobenzeneTrimethylammoniumBromide in Neonatal Rat Cardiomyocytes // PLoS One. 2016. V. 11(3).

УДК 532.1

Исследование зависимости размера капли сателлита от размеров основной капли

М.А. Юденкова, Е.С. Егорова

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Рассмотрен процесс отрыва капли с образованием капли сателлита. Интерес к изучению отрыва капель связан с проблемами оптимизации прямого впрыска топлива в двигатели, струйной печати, капельного охлаждения и других процессов.

Образование капли сателлита – достаточно сложный процесс, сопровождающийся многочисленными интересными явлениями. На сегодняшний день не существует универсальной математической модели, позволяющей всесторонне описать отрыв одиночной капли жидкости.

В работе полагается, что в момент, непосредственно предшествующий отрыву, помимо статических сил тяжести и сил поверхностного натяжения, существенную роль начинают играть силы, связанные с динамикой перетекания жидкости из основной капли в область капли сателлита и наоборот. Поэтому можно сделать предположение о наличии зависимости размеров сателлита от основной капли.

Для экспериментального исследования зависимости использовалась следующая установка (рис. 1).

Ход работы.

1. При отрыве капли от капилляра происходило образование основной капли и шарика Плато. Сформированные капли, попадая в менее плотную среду (масло), но более плотную, чем воздух, замедлялись, что позволяло сделать качественные снимки.

2. По сделанным фотографиям проведены расчеты, результаты откалиброваны.

3. По полученным данным построены графики зависимости: $r = r(\Delta P)$ и $\ln r = f(\Delta P)$.

На рис. 2 приведены графики зависимостей радиуса капли-сателлита от разности давлений в каплях и этот же график в логарифмическом масштабе.

Из результатов эксперимента получена зависимость: $r = 2,98 \cdot e^{-0.01 \Delta P}$.

Предэкспоненциальный множитель: $A = (2,98 \pm 0,07)$ мм

Коэффициент перед ΔP : $k = (-1, 03 \pm 0, 05) \cdot 10^{-2} \, \Pi a^{-1}$

Для математического моделирования отрыва капли с образованием капли сателлита были использованы уравнения Колмогорова. В результате получена следующая качественная зависимость:

$$V_2 \sim V_1 e^{\Delta P} \,.$$

Здесь V_1 – объём основной капли в отсутствие капли сателлита, $\Delta P = \sigma \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R}\right)$, R и r – радиусы основной капли и капли сателлита соответственно.







- 1. *Сивухин Д.В.* Общий курс физики. Т.2. Термодинамика и молекулярная физика. М.: Физматлит, 2005. 544 с.
- 2. Венцель Е.Н. Теория случайных процессов. М.: Наука, 1996. 400 с.
- 3. Чашечкин Ю.Д., Прохоров В.Е. Отрыв одиночной капли. М.: Наука, 2014. 31 с.
- 4. *Саранин В.А.* Равновесие жидкостей и его устойчивость. М.: Институт компьютерных исследований, 2002. 144 с.

УДК 537.9

Спектр тепловых магнонов в пленках железо-иттриевого граната

В.С. Теплов, В.Д. Бессонов, А.В. Телегин

Институт физики металлов УрО РАН

Процессы неупругого рассеяния оптического излучения магнитными средами в результате его взаимодействия с локальными флуктуациями намагниченности этих сред (мандельштам-бриллюэновского рассеяние света – МБРС) являются ключевым бесконтактным методом изучения спектров ферромагнитного резонанса, динамики и спектров магнонов в магнитных микро- и наноструктурах [1, 2]. Интенсивность МБРС пропорциональна квадрату амплитуды флуктуаций намагниченности. В то же время интенсивность рассеянного света и величины сдвига очень малы (например, сдвиг менее 0,5 см⁻¹ от рэлеевской линии с интенсивностью, меньшей на 5–7 порядков). Однако эти параметры можно зафиксировать в развитой методике с использованием одномодового монохроматического лазера и многопроходного интерферометра Фабри–Перо [2].

Цель данной работы заключалась в изучении спектра собственных (тепловых) магнитных колебаний в пленках магнитного диэлектрика на основе железо-иттриевого граната (ЖИГ) ($Y_3Fe_5O_{12}$) методом МБРС. Исследуемые пленки толщиной 4,5 мкм были выращены на подложке $Gd_3Ga_5O_{12}$ (111) методом жидкофазной эпитаксии. Магнитное поле до 4 кЭ прикладывалось в плоскости пленки. Излучение лазера фокусировалось на образце сначала со стороны пленки, затем со стороны подложки для выделения вкладов, связанных с поверхностью и объёмом магнитного материала.

В ходе экспериментов методом МБРС были получены спектры рассеянного света в пленке $Y_3Fe_5O_{12}$ во внешнем магнитном поле при комнатной температуре. Показано, что частоты детектируемых пиков рассеянного света зависят от величины поля, что говорит об их магнитном происхождении. На рис. 1 изображена дисперсионная зависимость полученного спектра, которая хорошо описывается приближением Кителя для ферромагнитного резонанса и дисперсионной зависимостью магнонов в приближении Калиникоса–Славина [3]. Показано, как изменение геометрии эксперимента от обратного к квазипрямому рассеянию света приводит к уширению и размытию формы спектра и появлению саттелитных линий. Анализ полученных результатов показал, что данное поведение спектров обусловлено комбинацией вкладов объемных и поверхностных магнитостатических спиновых волн [3], имеющих соответственно обменную и дипольную природу, в спектре МБРС изученных пленок.



Рис. 1. Зависимость дисперсии поверхностных (а) и объемных спиновых волн (б) и полученного спектра в пленке ЖИГа. Область обратного рассеяния (О) и квазипрямого рассеяния (К)

Работа выполнена при поддержке государственного задания ФАНО России (тема «Спин» № 01201463330) и программы УрО РАН № 15-9-2-4, грант No. 14.Z50.31.0025.

Литература

- 1. Коттам М.Г., Локвуд Д.Дж. Рассеяние света в магнетиках М.: Наука, 1991. 7 с.
- Demokritov S.O. and Demidov V.E. Micro-Brillouin Light Scattering Spectroscopy of Magnetic Nanostructures // IEEE Transactions on magnetics. 2008. V. 44. N 1, P. 6–7.
- 3. *Kalinikos B.A., Slavin A.N.* Theory of dipole-exchange spin wave spectrum for ferromagnetic films with mixed exchange boundary conditions // Solid State Phys. 1986. V. 19. P. 7022.

УДК 004.942

Применение транспортного кода GEANT4 в задачах рентгеновской и гамма-томографии и неразрушающего контроля

М.Е. Зелёный^{1,2}, А.В. Зелёная¹

¹Институт ядерных исследований РАН ²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Необходимость решать задачи томографии (получения послойного изображения) и неразрушающего анализа внутренней структуры объектов возникает в различных прикладных областях, таких как медицинская диагностика и обеспечение транспортной безопасности. Обычно в таких задачах используют высокоэнергетичные фотоны. Несмотря на то, что для томографии человека и железнодорожных контейнеров используют различные диапазоны энергий, применяемые методики очень похожи. В данной работе мы рассмотрим применение транспортного кода GEANT4 [1, 2] для моделирования пространственно-энергетических спектров фотонов проходящих через исследуемые объекты. В качестве исследуемых объектов рассматривались: водный фантом человека с микрочастицами (рис. 1), стальной контейнер со свинцовыми, алюминиевыми и урановыми шарами в однородной среде, и стальной предмет сложной формы (рис. 2). В симуляциях с транспортным контейнером спектр источника излучения моделируется на основе спектра тормозного излучения пучка электронов с энергиями 8 и 10 МэВ, облучающих вольфрамовую фольгу, полученного также при помощи GEANT4 (на использовании двух энергий основан метод дуальной энергии, описанный в работе [3]). В симуляции с водным фантомом используется равномерный плоский источник фотонов с энергиями в диапазоне 30-500 КэВ.



Рис. 1. Отличие интенсивности фотонов с энергией 30 КэВ для микрочастиц (диаметр 200 мкм) железа и кальция в однородной водной среде (толщина 10 см)



Рис. 2. Стальной предмет сложной формы в транспортном контейнере, пространственное распределение гамма-квантов

- 1. Geant4 User's Guide for Application Developers by Geant4 Collaboration, 9 December 2016.
- 2. Physics Reference Manual by Geant4 Collaboration, 9 December 2016.
- 3. Гавриш Ю.Н., Бердников Я.А., Спирин Д.О., Передерий А.Н., Сафонов М.В., Романов И.В. Программный комплекс для восстановления интроскопических изображений с использованием метода дуальной энергии // Вопросы атомной науки и техники. 2010. № 3. С. 123–125.

УДК 536.2

Условия использования датчиков теплопроводности для исследования взаимной диффузии газов

В.Е. Лазарева, Е.С. Серягина, О.И.Смирнова

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В работе измерялись коэффициенты теплопроводности и взаимной диффузии бинарной смеси гелий-воздух. Эксперименты проводились на двух установках для проведения лабораторных работ курса термодинамики и молекулярной физики МФТИ: 2.2.1 («Исследование взаимной диффузии газов») и 2.2.2 («Измерение теплопроводности воздуха при разных давлениях») [1]. Были установлены диапазоны давлений и концентраций смеси газов, при которых датчик теплопроводности можно применять для измерения взаимной диффузии гелий–воздух.

Установка для измерения взаимной диффузии газов представляет собой две вертикально расположенные стеклянные цилиндрической формы колбы, соединенные краном. Верхняя колба наполняется смесью воздуха и гелия при заданном давлении, а нижняя – только воздухом при таком же давлении. При соединении колб происходит диффузионное выравнивание концентрационного состава газовых смесей. Изменение концентрации компонент смеси Δn экспоненциально уменьшается во времени. Для регистрации Δn используются расположенные в колбах датчики теплопроводности. Датчики представляют собой натянутые по оси колбы тонкие платиновые нити, контактные выводы которых включены в мостовую схему. Мощность нагрева обеих нитей одинаковая, а сопротивление нитей меняется в зависимости от состава газовой смеси. Разность сопротивлений датчиков измеряется по напряжению U разбаланса моста.

Измерение коэффициента диффузии D мы провели в широком диапазоне давлений. Опыты проводились по стандартной методике: смесь содержала малую долю примеси гелия в воздухе (< 15%). Оказалось, что линейный рост D при понижении давления (в соответствии с теорией [2, 3]) обрывается при давлениях, ниже 27 торр: происходит резкое изменение скорости диффузии, что приводит к искажению результатов: коэффициент диффузии резко падает (рис. 1).

Причина наблюдаемого явления состоит в том, что при низких давлениях резко уменьшается коэффициент теплопроводности к газов. Это видно из результатов измерений к воздуха и гелия при разных давлениях. На рис. 2 приведены результаты для теплопроводности гелия. Существенное уменьшение коэффициента теплопроводности при низких давлениях газов связано со сменой механизма передачи тепла: при давлениях, когда длина свободного пробега молекул становится одного порядка с радиусом нити датчика, происходит локальный перегрев нити (т. н. температурный скачок).

Таким образом, корректные результаты по измерению коэффициента взаимной диффузии с данными датчиками теплопроводности возможны лишь при давлениях, выше 27 мм рт. ст.

В работе были также проведены измерения коэффициента теплопроводности смеси гелия и воздуха, причем концентрация гелия в смеси изменялась от 0 до 100%. Оказалось, что коэффициент теплопроводности квадратично возрастает с ростом доли гелия в смеси (рис. 3). Эффект сверх линейного роста коэффициента теплопроводности смеси, возможно,

обусловлен как увеличением «вклада гелия», так и увеличением средней длины свободного пробега молекул в смеси газов с увеличением содержания гелия [2].

Результаты измерения коэффициента взаимной диффузии *D* с увеличением процентного содержания гелия в начальной смеси от 0 до 100% показали, что значение *D* в пределах погрешности опыта практически не зависит от доли гелия, что находится в соответствии с теоретическими данными [3].



Рис. 1. Зависимость коэффициента взаимной диффузии от величины обратного давления



Рис. 2. Зависимость коэффициента теплопроводности гелия и от давления Р



Рис. 3. Коэффициент теплопроводности смеси воздуха и гелия в зависимости от доли гелия, измеренные при давлении смеси 82 мм рт. ст. (точки) и 120 мм рт. ст. (крестики)

Выражаем благодарность сотрудникам учебно-лабораторного комплекса Ю.М. Артамонову и Н.Я. Поповой за изготовление установки по диффузии, оказание помощи в проведении экспериментов и проявленный интерес к работе.

Литература

- Лабораторный практикум по общей физике: учебное пособие. В трёх томах. Том 1. Термодинамика и молекулярная физика/ под ред. А.Д. Гладуна. 3-е изд., испр. М.: МФТИ, 2012. С. 110–119.
- 2. *Щёголев И.Ф.* Элементы статистической механики, термодинамики и кинетики. М.: Интеллект, 2008.
- 3. *Сивухин Д.В.* Общий курс физики. Т. 2. Термодинамика и молекулярная физика. М.: Физматлит, 2006.

Секция фотоники и двумерных материалов

УДК 537.87, 621.32

Увеличение яркости однофотонных источников на основе алмаза в обход технологических ограничений легирования

И.А. Храмцов, Д.Ю. Федянин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Центры окраски в алмазе и других широкозонных полупроводниках на настоящий момент являются наиболее перспективными источниками одиночных фотонов по требованию. Реализация устройств на основе центров окраски, работающих от электрической накачки при комнатной температуре, позволит наиболее просто с практической точки зрения создать кванто-защищённые линии связи, которые защищены от прослушки физическими законами. Ранее было показано, что концентрации электронов и дырок вблизи центра окраски являются определяющим фактором в работе однофотонного источника как в стационарном [1], так и в динамическом [2] режимах. И чем выше концентрации, тем быстрее будут генерироваться единичные фотоны. Однако существуют технологические проблемы легирования алмаза, которые накладывают ограничения на максимальную концентрацию носителей заряда. Типичный уровень компенсации акцепторов в алмазе р-типа составляет 1%, что соответствует концентрации дырок в валентной зоне $4 \cdot 10^{14}$ см⁻³. Эффекты компенсации для доноров намного сильнее и легированием можно создать лишь $6 \cdot 10^{10}$ см⁻³ электронов в зоне проводимости. Если инжектировать все эти носители в окрестность центра окраски, то скорость генерации одиночных фотонов не будет превышать тысячи фотонов в секунду, что крайне мало для любых практических применений.

В этой работе продемонстрировано, что благодаря эффекту накопления носителей в алмазном *p-n* диоде можно достичь яркость однофотонного источника на основе алмаза на уровне миллионов фотонов в секунду при электрической накачке при комнатной температуре. Также, данный эффект был исследован в зависимости от материальных параметров диода и найдены оптимальные параметры.



Рис. 1. Максимальная скорость эмиссии в зависимости от тока через *p-n* диод при разных уровнях компенсации доноров в *n*-области.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации МК-2602.2017.9.
Литература

- 1. *Fedyanin D.Yu., and Agio M.* Ultrabright single-photon source on diamond with electrical pumping at room and high temperatures // New J. Phys. 2016. V. 18.
- 2. *Khramtsov I.A., Agio M., and Fedyanin D.Yu.* Dynamics of Single-Photon Emission from Electrically Pumped Color Centers // Phys. Rev. Applied. 2017. V. 8, I. 2.

УДК 537.87, 621.32

Корреляция между одиночными фотонами, испускаемыми центрами окраски в алмазе при электрической накачке

И.А. Храмцов, Д.Ю. Федянин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Для реализации кванто-защищённых линий связи, необходимых для полной защиты передаваемой информации от подслушивания, требуются источники неклассического света, которые позволяют генерировать единичные фотоны по требованию [1]. С практической точки зрения они должны работать при комнатной температуре и от электрической накачки. В этой связи наиболее перспективными для однофотонной эмиссии являются центры окраски в алмазе и других широкозонных полупроводников.

В этой работе подробно изучена корреляция между испускаемыми фотонами при электрической накачке центров окраски в разных режимах инжекции носителей. Недавно нами был разработан подход для описания автокорреляционной функции второго порядка [2]:

$$g^{(2)}(\tau) = 1 + ae^{-|\tau|/\tau_1} - (1+a)e^{-|\tau|/\tau_2},$$
(1)

где τ_1 и τ_2 ответственны за времена группировки и антигруппировки фотонов:

$$\tau_{1,2} = 2 \left\{ \left[\frac{1}{\tau_0} + c_n n + c_p p + \left(e_n + e_p + e_r \right) \right] \pm \frac{1}{\sqrt{\left[c_n n - c_p p - \frac{1}{\tau_0} + \left(e_n + e_r - e_p \right) \right]^2 - 4 \left[\frac{c_p p}{\tau_0} - \left(\frac{c_p p e_n + e_r}{\tau_0} - \frac{e_n e_r}{\tau_0} \right) \right]} \right\}^{-1},$$
(2)

где *n* и *p* – концентрации электронов и дырок вблизи центра окраски. Остальные параметры являются материальными [2].

На рис. 1 показаны зависимости τ_1 и τ_2 от концентрации носителей заряда. Видно, что эти зависимости немонотонны, как в случае оптической накачки. Поскольку при малых *n* и *p*, соответствующих типичным экспериментальным значениям (оранжевая область на рис. 1(а)), τ_1 не сильно отличается от времени жизни возбужденного состояния NV⁰ центра ($\tau_0 = 5.1$ нс), а τ_2 на несколько порядков превосходит τ_0 , то корреляция между генерируемыми фотонами определяется лишь временем τ_1 . В то же время при очень высоких уровнях инжекции носителей в окрестность центра окраски и Re(τ_1), и Re(τ_2) могут быть значительно ниже времени жизни τ_0 возбужденного состояния, что принципиально отличает центры окраски от классических систем.



Рис. 1. Характерные времена τ₁ [панели (а) и (б)] и τ₂ [панели (в) и (г)] автокорреляционной функции второго порядка для NV центров в алмазе при электрической накачке.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации МК-2602.2017.9.

Литература

- 1. Sergienko A.V. Quantum Communications and Cryptography Boca Raton: CRC Press, 2005.
- 2. *Khramtsov I.A., Agio M., and Fedyanin D.Yu.* Dynamics of Single-Photon Emission from Electrically Pumped Color Centers // Phys. Rev. Applied. 2017. V. 8, I. 2.

УДК 535.016

Высокочувствительные биосенсоры на основе плазмонных кольцевых микрорезонаторов

К.В. Воронин, Ю.В. Стебунов, А.В. Арсенин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В последние годы предложены различные конструкции оптических безмаркерных биосенсоров. Данные устройства имеют высокую чувствительность, позволяющую им обнаруживать малые концентрации различных молекулярных объектов. Помимо этого, такие биосенсоры отличают достаточно малые размеры, а также возможность их интеграции в различные электронные устройства. Принцип детектирования биологических объектов основан на их адсорбции на поверхности оптических структур, приводящей к изменению оптических свойств среды и, как следствие, выходного оптического сигнала. Известными и хорошо исследованными являются конструкции оптических биосенсоров на основе фотонных кольцевых микрорезонаторов [1]. Они позволяют достичь высокой чувствительности при небольших линейных размерах устройства. С развитием плазмоники существенно увеличилось разнообразие биосенсоров и улучшились их характеристики. Достаточно эффективной является конструкция на основе схемы Кречмана с наблюдением поверхностного плазмонного резонанса [2]. Сейчас также рассматриваются схемы с микрорезонаторами [3], плазмонными аналогичные схемам с фотонными микрорезонаторами.

В данной работе предложена схема компактного биосенсора с плазмонным кольцевым микрорезонатором. Работа рассматриваемого биосенсора была проанализирована с использованием аналитических расчетов и численного моделирования в программном пакете COMSOL Multiphysics. Для удобства была рассмотрена двумерная геометрия: плазмонный волновод и расположенный рядом резонатор, в котором возбуждаются моды шепчущей галереи (рис. 1). Для этой схемы приведены расчеты чувствительности и добротности резонатора, проведен анализ эффективности биосенсора в зависимости от геометрических параметров. Связывание собственных мод волновода и резонатора приводит к появлению минимумов и максимумов пропускания (рис. 2а). Изменение показателя преломления внешней среды вызывает сдвиг по длине волны резонансных пиков. По изменению резонансной длины волны и происходит детектирование изменения показателя преломления (рис. 26). Несмотря на то, что плазмонный резонатор уступает фотонному по добротности, для биосенсора, основанного на плазмонном микрорезонаторе, удается достичь большой чувствительности – около 2 мкм, тогда как для фотонного биосенсора чувствительность, как правило, не превышает 0,5 мкм.



Рис. 1. Распределения электрических полей, полученные для двумерной модели биосенсора на длинах волн 1.48 мкм, соответствующих (а) резонансу микрокольцевого резонатора и 1.50 мкм (б) отсутствию резонанса



Рис. 2. График зависимости пропускания от длины волны (а). Сдвиг пиков при изменении показателя преломления (б)

- Xu D.X., Densmore A., Delage A., Waldron P., McKinnon R. Folded cavity SOI microring sensors for high sensitivity and real time measurement of biomolecular binding // Optics express. 2008. V. 16. N. 19. P. 15137 – 15148.
- 2. *Mullett W., Lai E.P.C., Yeung J.M.* Immunoassay of Fumonisins by a Surface Plasmon Resonance Biosensor // Analytical biochemistry. 1998. N 258. P. 161–167.
- 3. Zhou L., Sun S., Li X., Chen J. Miniature Microring Resonator Sensor Based on a Hybrid Plasmonic Waveguide // Sensors. 2011. N 11. P. 6856–6867.

Бистабильность в металл-полупроводниковых нанолазерах, вызванная саморазогревом

А.А. Вишневый, Д.Ю. Федянин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В последние годы наноразмерные источники когерентного излучения – нанолазеры – привлекают большой интерес, что связано с их уникальными возможностями в области обработки данных и наноспектроскопии. Отличительным элементом конструкции нанолазера является металлическое покрытие резонатора, которое позволяет достичь одновременно очень малого модового и физического объема устройства [1]. Сильное оптическое поглощение в металле обуславливает выбор объемного полупроводника в качестве усиливающей среды. В рабочем режиме в этом полупроводнике необходимо создать высокую степень инверсной населенности для получения достаточного оптического усиления (~100 - 1000 см⁻¹). Это приводит к тому, что тепловыделение в активной зоне начинает оказывать существенное влияние на поведение нанолазера при работе в непрерывном режиме (такой режим работы необходим для применений в передаче и обработке данных). Одним из последствий саморазогрева лазера является тепловой загиб ватт-амперной характеристики лазера, ограничивающий максимальную выходную мощность нанолазера (рис. 1). При анализе выходных характеристик было обнаружено, что тепловой загиб в нанолазерах может иметь бистабильный характер, что обусловлено уникальным сочетанием малого физического размера устройства и большой долей тепловыделения, приходящейся на безызлучательную Оже-рекомбинацию, темп которой определяется концентрацией носителей заряда в активной зоне нанолазера. Другие типы тепловыделения, мощность которых зависит от тока накачки, изменяют характер загиба и могут подавить бистабильность, однако если их доля в полном тепловыделении невелика, то бистабильность сохраняется.

Описанная в данной работе бистабильность является фундаментально новым типом бистабильности в лазерах, поскольку не требует существования двух и более конкурирующих мод.



Рис. 1. Ватт-амперные характеристики нанолазера при различных добротностях резонатора.

Работа поддержана грантом РНФ 17-79-10488 и грантом Президента Российской Федерации МК-2602.2017.9.

Литература

1. *Ding K. and Ning, C.Z.* Metallic subwavelength-cavity semiconductor nanolasers // Light: Science and Applications. 2012. 1. e20.

УДК 538.935

Общая теория токовых неустойчивостей в транзисторных структурах на основе двумерных электронных систем

А.С. Петров, Д.А. Свинцов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

На настоящий момент существует значительная потребность в компактных и эффективных источниках и детекторах излучения терагерцового (ТГц) диапазона, причём одним из наиболее перспективных классов источников ТГц излучения на данный момент видятся транзисторные структуры на основе двумерных электронных систем. Так, их размер не превышает десятков микрон, а возможность ТГц генерации при комнатной температуре из таких структур была недавно продемонстрирована экспериментально [1].

Принцип работы подобных устройств заключается в возбуждении плазменных колебаний (плазмонов) в канале транзистора протекающим постоянным током (токовые неустойчивости); далее энергия плазмонов конвертируется в излучение благодаря радиационному затуханию. Поэтому сейчас активно изучаются механизмы возбуждения таких неустойчивостей, и было предложено множество различных интерпретаций экспериментальных данных [2, 3], однако ни одна из существующих теорий не является общепринятой.

Наше исследование направлено на построение общей теории плазменных неустойчивостей в транзисторных структурах на основе двумерных электронных систем. Применение аппарата теории возмущений к системе уравнений электронной гидродинамики позволило получить общие выражения для мнимых поправок (линейных по скорости дрейфа, являющейся малым параметров теории) к собственным частотам плазмонных мод. Таким образом, наша теория позволяет по известным "нулевым" функциям *произвольной* несмещенной структуры вычислить инкременты неустойчивости при малых скоростях дрейфа. Одним из предсказаний построенной теории является принципиальная невозможность возбуждения плазменных колебаний в транзисторных структурах, обладающих центром симметрии, что раньше было получено лишь в ряде частных случаев [4].

С другой стороны, в транзисторных структурах с геометрической асимметрией или асимметрией распределения концентрации носителей мнимая часть частоты в общем случае не равна нулю при конечном значении тока. Таким образом, токовые неустойчивости двумерных электронов являются общим свойством асимметричных структур и не требуют специальных граничных условий [2], как считалось ранее.

- 1. *El FatimyA* [*et.al.*]. AlGaN/GaN high electron mobility transistors as a voltage-tunable room temperature terahertz sources // Journal of Applied Physics. 2010. V. 107. 024504.
- 2. *Dyakonov M., Shur M.* Shallow water analogy for a ballistic field effect transistor: New mechanism of plasma wave generation by dc current // Physical Review Letters. 1993. V. 71. P. 2465.
- 3. *PetrovA.S.* [*et.al.*]. Amplified-reflection Plasmon instabilities in grating-gate plasmonic crystals // Physical Review B. 2017. V. 95. 045405.
- 4. *Kachorovskii V., Shur M.* Current-induced terahertz oscillations in plasmonic crystal // Applied Physics Letters 2012. V. 100. 232108.
- 5. *Ryzhii V.* [*et.al.*]. Mechanism of self-excitation of terahertz plasma oscillations in periodically doublegated electron channels // Journal of Physics: Condensed Matter. 2008. V. 20. 384207.
- 6. *Ryzhii V., Satou A., Shur M.* Transit-time mechanism of plasma instability in high electron mobility transistors // Physica Status Solidi (a). 2005. V. 202. R113 R115.
- 7. *Dyakonov M., Shur M.* Current instability and plasma waves generation in ungated two-dimensional electron layers // Applied Physics Letters. 2005. V. 87. 111501.
- 8. *Aizin G., Mikalopas J., Shur M.* Current-driven plasmonic boom instability in three-dimensional gated periodic ballistic nanostructures // Physical Review B. 2016. V. 93. 195315.
- 9. *Petrov A.S.* [*et.al.*]. Plasma Instability of 2D Electrons in a Field Effect Transistor with a Partly Gated Channel // International Journal of High Speed Electronics and Systems. 2016. V. 25. 1640015.

Метод STED-фотолитографии для создания фотонных структур

А.В. Писаренко, Д.А. Колымагин, Д.А. Чубич

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Благодаря высокой скорости передачи информации с помощью оптических сигналов наблюдается бурное развитие оптоэлектронной технологии. Одним из основных направлений этого развития является создание оптических элементов, необходимых для получения сложных устройств управления светом (поляризацией, амплитудой, фазой и волновым фронтом). На сегодняшний день одним из наиболее успешных методов создания трехмерных структур является метод прямой лазерной печати (DLW – Direct Laser Writing) [1]. Было показано, что данный метод позволяет создавать структуры с разрешением менее 100 нм [2]. В дальнейшем на основе DLW литографии появился метод STED-фотолитографии (STED – STimulated Emission Depletion), использующий технологию тушения вынужденным излучением, благодаря которой стало возможным преодоление дифракционного предела и, как следствие, улучшение разрешения по сравнению с DLW и другими техниками письма.

Физическую основу метода составляет явление фотополимеризации за счёт взаимодействия излучения и фоторезиста, состоящего из молекул фотоинициатора и мономера. Под действием излучения фемтосекундного лазера молекулы фотоинициатора переходят в возбужденное состояние, после чего безызлучательно релаксируют в триплетное состояние и передают энергию молекулам мономера, которые, в свою очередь, образуют радикалы, объединяющиеся в длинные молекулы полимера. Основу метода STED составляет использование лазера тушения, снимающего возбуждение фотоинициатора в некоторой области. Благодаря специальному профилю распределения интенсивности лазера тушения в пространстве (с малой интенсивностью в центре), полученной с помощью фазовой пластинки $\lambda/4$ и вихревой фазовой пластинки, область с возбужденным фотоинициатором существенно уменьшается, что делает возможным преодоление дифракционного предела. Данный метод, примененный для конструирования STED-микроскопа, был использован С. Хеллом, удостоенным за эту работу Нобелевской премии по химии в 2014 году.

В данной работе были исследованы оптические свойства полученных методом STED-фотолитографии структур. С помощью электронного микроскопа исследованы структурные свойства созданных образцов: геометрические параметры, состав, морфология, в зависимости от параметров печати. С помощью ИК-фурье-спектрометра были измерены спектральные свойства тестовых образцов. Также благодаря использованию контактной атомно-силовой микроскопии были изучены их локальные механические свойства и проведено сопоставление полученных результатов.

Технологическая часть работы выполнена при поддержке гранта РНФ № 15-19-00205. Возможность проведения тонких оптических экспериментов предоставлена грантом РФФИ 17-02-01408.

Литература

2. Malinauskas M., Farsari M., Piskarkas A., Juodkazis S. // Phys. Rep. 2013. 533 (1) (2013). P. 1-31.

^{1.} Baldaccini, T. Three-dimensional microfabrication using two-photon polymerization. Elsevier (2015).

УДК 537.9

Неупругое туннелирование с участием плазмонов в ван-дер-ваальсовых структурах на основе графена

А. Былинкин, В. Еналдиев, Д. Свинцов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Гетероструктуры на основе графена и родственных двумерных материалов рассматриваются как составные блоки новых электронных и нанофотоных приборов. Процессы упругого туннелирования электронов в вертикальных графеновых структурах изучены достаточно полно как с теоретической [1], так и с экспериментальной точки зрения [2]. Однако, кроме упругого туннелирования, в данных структурах возможно и неупругое туннелирование с участием плазмонов, что подтверждается недавним наблюдением электролюминесценции из структуры «графен–диэлектрик–графен» [3]. Неупругие процессы туннелирования электронов в данных структурах могут стать основой для создания плазмонных источников и детекторов.

В данной работе развита теория неупругого туннелирования с участием поверхностных плазмонов в структуре «графен–диэлектрик–графен» в присутствии электрического напряжения между слоями, а также рассчитано влияние данного эффекта на электролюминесценцию и вольт-амперную характеристику рассматриваемой структуры [4]. Наш теоретический подход основан на расчете туннельного тока, вызванного динамически экранированным кулоновским взаимодействем между носителями заряда. Динамическое экранирование приводит к резонансному туннелированию, если энергия и импульс, передаваемые при рассеянии, совпадают с энергией и импульсом поверхностного плазмона. Этот резонансный вклад может быть явно выделен из полного неупругого тока в структуре. Наши вычисления показывают наличие резонансов на вольт-амперной характеристике двухслойной графеновой структуры из-за усиленного взаимодействия между коллинеарными электронами и поверхностными плазмонами. Этот резонанс тесно связан с линейным законом дисперсии в графене и отсутствует в структурах на основе классических полупроводников. Резонанс в туннельном токе с участием плазмона будет сопровождаться резонансом в электролюминесценции. Мы оценили скорость радиационного затухания поверхностных плазмонов и показали, что эффективность конверсии плазмонов в фотоны может составлять порядка 10%.

Литература

- 1. *Vasko F.T.* Resonant and nondissipative tunneling in independently contacted graphene structures // Physical Review B. 2013. V. 87. N 7. P. 075424.
- 2. *Mishchenko A*. [*et al.*]. Twist-controlled resonant tunnelling in graphene/boron nitride/graphene heterostructures // Nature nanotechnology. 2014. V. 9. N 10. P. 808–813.
- 3. *Yadav D.* [*et al.*]. Terahertz wave generation and detection in double-graphene layered van der Waals heterostructures // 2D Materials. 2016. V. 3. N 4. P. 045009.
- Enaldiev V., Bylinkin A., Svintsov D. Plasmon-assisted resonant tunneling in graphene-based heterostructures // Physical Review B. 2017. V. 96. N 12. P. 125437.

УДК 537.872

Формализм квазинормальных мод и его использование для описания оптических нанорезонаторов

И.М. Фрадкин, Д.Ю. Федянин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Одна из основных задач современной фотоники – усиление взаимодействия света с веществом. На его основе становится возможным создавать эффективные источники и детекторы излучения, а также наблюдать многие интересные эффекты, например, в

поляритонике – науке о составных квазичастицах, образующихся за счет взаимодействия фотонов с коллективными возбуждениями среды. Добиться усиления взаимодействия можно при помощи оптических нанорезонаторов, которые позволяют увеличить локальную плотность оптических состояний. Именно поэтому исследование резонаторов и их разработка для нужд конкретных задач представляет большую важность.

Несмотря на то, что исследовать элементарные излучатели в нанорезонаторах можно при помощи прямого моделирования методами конечных элементов (finite element method) или конечной разности во временной области (finite-difference time domain method), проектирование нанорезонаторов и улучшение их характеристик такими методами является весьма затруднительной задачей. Однако поскольку электромагнитное поле резонатора определяется главным образом собственными модами, то наиболее перспективным представляется двухэтапный подход на основе собственных мод: (1) на первом этапе нужно найти собственные резонансы структуры, а затем (2) рассмотреть их взаимодействие с веществом. Такой подход позволяет намного лучше понять физику процесса излучения и выбрать тип и параметры резонатора. В рамках такой концепции удобно описывать эффект Парселла, явление увеличения скорости дипольного излучения в резонаторе. Зная добротность Q и объем моды V, можно определить скорость спонтанной эмиссии в эту моду согласно известному соотношению

$$F_p = \frac{3}{4\pi^2} \left(\frac{\lambda}{n}\right)^3 \left(\frac{Q}{V}\right),\tag{1}$$

где λ/n – длина волны излучения в материале [1]. Однако, например, для плазмонных резонаторов формула Парселла становится неприменима [2] ввиду больших потерь на поглощение в металле и излучение. В этом случае мы имеем дело с квазинормальными модами, которые требуют специального изучения.

В данной работе мы рассмотрим теорию дипольного излучения в квазинормальные моды [3]. Будут исследованы особенности, проявляющиеся при излучении в них – не лоренцева форма линии, отрицательная скорость излучения в моду и другие. Мы определим точность теории и границы ее применимости, а также применим ее к исследованию и проектированию плазмонных наноантенн для однофотонных источников.





Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации МК-2602.2017.9.

- Purcell E.M. Spontaneous emission probabilities at radio frequencies // Phys. Rev. Lett. 1946 V. 69. P. 681.
- 2. Koenderink A.F. On the use of Purcell factors for plasmon antennas // Opt. Lett. 2010. V. 35. P. 4208.

3. Sauvan C., Hugonin J.P., Maksymov I.S., Lalanne P Theory of the spontaneous optical emission of nanosize photonic and plasmon resonators // Phys. Rev. Lett. 2013 V. 110. P. 237401.

УДК 537.862

Плазменные неустойчивости двумерных электронов в полевом транзисторе с асимметричным затвором

М.К. Маслов, А.С. Петров, Д.А. Свинцов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Активное изучение плазменных неустойчивостей в полевых транзисторах в последние годы обусловлено недавно предсказанной возможностью самовозбуждения плазменных волн в каналах таких транзисторов и генерации терагерцового излучения при пропускании постоянного тока [1, 2]. С другой стороны, полевые транзисторы с высокой электронной подвижностью являются эффективными детекторами ТГц-излучения. Было показано [3], что величина фототока связана с разностью пространственных фурьекомпонент ближнего поля дифракции одного порядка. Различие фурье-компонент возможно только в структурах с асимметрией элементарной ячейки [4] (рис. 1). Нами предложен метод количественного описания эффекта, основанный на решении уравнений Максвелла методом сведения к интегральному уравнению и поиска решений в виде комбинации ортогональных полиномов [5]. Решаемое интегролинейной дифференциальное уравнение для расчёта электрического поля в системе имеет вид

$$E_{x}^{tot}(\mathbf{x}) = E_{0} \left[1 - \frac{\frac{2\pi}{c\sqrt{\varepsilon}} \sigma_{2D}(\mathbf{G} = \mathbf{0}, \omega)}{1 + \frac{2\pi}{c\sqrt{\varepsilon}} \sigma_{2D}(\mathbf{G} = \mathbf{0}, \omega)} \right] \times \sum_{m=1}^{2} \left[\int_{gate \, m} \frac{dx'}{W_{m}} \theta_{m}(\mathbf{x}') \mathbf{L}_{m}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \mathbf{E}_{x}^{tot}(\mathbf{x}') \right], \tag{1}$$

где $L_m(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ – функции Грина электродинамической задачи, $\theta_m(\mathbf{x})$ – обезразмеренная концентрация носителей заряда в затворах, W_m – ширины затворов, ε – диэлектрическая постоянная подзатворного диэлектрика, $\sigma_{2D}(\mathbf{G}, \omega)$ – проводимость двумерного электронного газа, зависящая от волнового вектора и частоты.

Был разработан численный метод решения уравнения (1) с использованием метода ортогональных полиномов, рассмотренного в статье [5] для симметричной структуры. Также был разработан метод вычисления коэффициента пропускания (рис. 2) и фурье компонент электрического поля (рис. 3) в случае транзистора с асимметричным затвором. На основании проведённых численных расчётов в данный момент происходит создание описанных структур для применения в экспериментах. Разработанный метод может быть применён для численной оценки собственных частот асимметричной системы, для решения задачи оптимизации фотоотклика системы, а также для связи инкремента колебаний с частотой падающего излучения. Впоследствии рассматриваемый эффект может быть использован для создания генераторов и детекторов терагерцового излучения на основе полевых транзисторов с асимметричным расположением затворов.







Рис. 2. Рассчитанные зависимости коэффициента пропускания от частоты падающего излучения для разных показателей заполнения решётки



Рис. 3. Рассчитанные зависимости амплитуд фурье-компонент различных порядков от частоты падающего излучения

Литература

- Mikhailov S.A. Graphene-based voltage-tunable coherent terahertz emitter // Phys. Rev. B. 2013. V. 87. P. 115405.
- 2. *Dyakonov M., Shur M.* Shallow Water Analogy for a Ballistic Field Effect Transistor: New Mechanism of Plasma Wave Generation by dc Current // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 71. P. 2465.
- 3. *Popov V.V.* [*et al.*]. Noncentrosymmetric plasmon modes and giant terahertz photocurrent in a twodimensional plasmonic crystal // Phys. Rev. B. 2015 V. 91. P. 235436.
- 4. *Liu D.* [*et al.*]. Efficiently Unidirectional Coupling of Surface Plasmons Based on Asymmetric Cascaded Nanoslits // IEEE Photonics Technology Letters. V. 27. P. 1671.
- 5. *Mikhailov S.A.* Plasma instability and amplification of electromagnetic waves in low-dimensional electron systems // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 1517.

УДК 538.915

Наноструктурирование метаматериалов с использованием графена

А.К. Нухов

Московский физико-технический институт (государственный университет) Институт физики им. Х.И. Амирханова ДагНЦ РАН Дагестанский государственный университет

В работе рассмотрены низкоразмерные электронные системы на основе графена и возможность реализации на их основе искусственно-наноструктурированных метаматериалов с потенциальными применениями в виде идеальных линз, устройств невидимости и других нанофотонных устройств для элементной базы наноэлектроники.

Использование новых материалов, например графена, открывает новые возможности в разработке наноструктурированных метаматериалов, обладающих уникальными оптическими свойствами. Расчет и анализ электронных характеристик графена и низкоразмерных систем на его основе для моделирования и создания таких наноструктурированных метаматериалов требует развития новых расчётных алгоритмов и использования мощных вычислительных комплексов.

Ранее были рассмотрены электронные состояния системы «квантовая точкамонослой графена-подложка SiO₂+n⁺Si» и продемонстрирована теоретическая возможность управляемого воздействия на электронные состояния данных систем с помощью электрических и магнитных полей [1]. Указанные эффекты напрямую связаны с оптическими свойствами данных низкоразмерных систем. Возможность варьирования оптическими свойствами низкоразмерных систем является одной из возможностей развития перспективных технологий искусственного наноструктурирования метаматериалов.

Одним из направлений создания метаматериалов является создание слоистых структур из диэлектриков и полупроводников. Такие структуры позволяют управлять электрическим током, но при этом являются весьма энергозатратными (10 кВт на 1 см²). Во-первых, это энергетически невыгодно, во-вторых, очень трудно подобрать материалы, способные выдержать такую мощность. Данную проблему можно решить, создавая промежуточные слои, в которых время жизни электрона значительно выше, но при этом необходимо задуматься, из каких материалов могут быть эти промежуточные слои, как будет преодолеваться данный барьер, а также каким образом будет обеспечиваться транспорт электронов в эти слои. В данной работе рассмотрены слоистые метаматериалы на основе графена. Во-первых, графен является истинно двумерной структурой. Во-вторых, благодаря дираковским фермионам графен занимает промежуточное положение между металлами и полупроводниками. Электроны в графене могут перемещаться с нулевой эффективной массой, что приводит к большим длинам свободного пробега. Всё это делает графен идеальным кандидатом для использования в качестве промежуточного слоя в таких слоистых метаматериалах. Более того, графен можно использовать в качестве

изолирующего слоя между полупроводником и промежуточным слоем, где электрон будет дольше находиться в свободном состоянии. Тогда графен будет выполнять функцию транзитного материала между этими слоями.

Литература

 Алисултанов З.З., Мейланов Р.П., Нухов А.К., Мусаев Г.М., Идаятов Э.И. Электронные состояния системы «квантовая точка–монослой графена–подложка SiO₂+n⁺Si » // Письма в ЖТФ. 2012. Т. 38. № 12. С. 1–5.

Секция прикладной оптики

УДК 520.84

Компактный гетеродинный спектрометр ближнего ИК-диапазона для мониторинга СО₂ в атмосфере Земли

С.Г. Зеневич¹, А.Ю. Климчук¹, В.М. Семенов¹, Д.В. Чурбанов¹, А.В. Родин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт космических исследований РАН

Наблюдаемое в течение двух столетий повышение концентрации парниковых газов, которое связывают со сжиганием ископаемого углеводородного топлива, послужило основанием заключения ряда международных соглашений, которые в свою очередь накладывают серьезные ограничения на индустриальное развитие ведущих стран. Национальные интересы России требуют развития собственной научной экспертизы в этой сфере, в частности создания системы контроля и прогноза эмиссии парниковых газов. На сегодняшний день наблюдаемый темп прироста концентрации парниковых газов затрудняет разработку глобальных климатических моделей и построение долгосрочных прогнозов. Для того чтобы это стало возможно, необходимо создание глобальной сети станций мониторинга, которые способны измерять концентрацию парниковых газов и восстанавливать их вертикальное распределение.

В 2004 году по инициативе США для валидации спутниковых данных была основана сеть глобальных мониторинговых станций TCCON [1] на основе фурьеспектрометров Bruker-125HR. Эти станции способны восстанавливать вертикальное распределение основных парниковых газов, однако имеющиеся 28 станций обладают недостаточным измерительным покрытием поверхности Земли, даже если включить в этот же список действующие спутниковые миссии.

Отсюда следует необходимость создания более дешевых, компактных и не уступающих по своим измерительным характеристикам приборов. Это подтверждается активной разработкой портативных спектрометров за последнее десятилетие, например портативный фурье-спектрометр [2] и портативный гетеродинный спектрометр [3].

Мы представляем улучшенную конфигурацию гетеродинного спектрометра ближнего ИК-диапазона, описание которого впервые было опубликовано в 2014 году [4]. В данной конфигурации мы значительно переработали и улучшили подсистемы спектрометра, отвечающие за стабилизацию частоты диодного лазера, процедуру обработки гетеродинного сигнала и процедуру слежения за Солнцем. Эти модификации привели к повышению стабильности лазера, увеличению отношения сигнал/шум (SNR), избавлению сигнала от нелинейности и способности заводить в оптическое волокно более мощный солнечный сигнал.

Измерения спектров поглощения проводились в г. Долгопрудном, на крыше корпуса прикладной математики МФТИ. На рис. 1а представлен спектр поглощения колебательно-вращательной линии CO_2 в относительных единицах пропускания, полученный с помощью гетеродинного спектрометра, а также спектр, рассчитанный на основе теоретической модели атмосферы. Легко видеть хорошее совпадение модельного и измеренного контуров на всем интервале спектра, включая максимум поглощения. Рисунки 16 и 1в демонстрируют вертикальное распределение концентрации CO_2 и профиль проекции ветра соответственно. Эти величины восстановлены теоретиками лаборатории прикладной инфракрасной спектроскопии только на основе спектров поглощения, измеренных гетеродинным спектрометром, и использования других моделей, например вертикального распределения температуры и давления. Восстановленный профиль находится в хорошем согласии с данными реанализа [1].

Дальнейшая доработка прибора предполагает замену конечного тракта на специализированный сигнальный процессор, улучшение массово-габаритных характеристик и разработку автономной системы слежения за Солнцем для установки прибора на мобильных платформах, в частности исследовательских морских и воздушных судах.



Рис. 1. Данные, полученные с помощью гетеродинного спектрометра: а) спектр поглощения колебательно-вращательной линии CO₂; б) вертикальный профиль распределения концентрации CO₂; в) вертикальный профиль проекции стратосферного ветра

- Toon G.C., Blavier J.-F.L., Washenfelder R.A., Wunch D., Keppel-Aleks G., Wennberg P.O., Connor B.J., Sherlock V., Griffith D.W.T., Deutscher N.M., and Notholt J.. Total Column Carbon Observing Network (TCCON), in Fourier Transform Spectroscopy // Optical Society of America. 2009. P. 4–7.
- Gisi M., Hase F., Dohe S., Blumenstock T., Simon A., Keen A. XCO2-measurements with a tabletop FTS using solar absorption spectroscopy // Atmos. Meas. Tech. 2012. V. 5. P. 2969–2980.
- Willson E.L., McLinden V.L., Miller J.H., Allan G.R., Ott L.E., Melroy H.R., Clarke G.B. Miniaturized laser heterodyne radiometer for measurements of CO2 in the atmospheric column // Appl. Phys. B. 2014. V. 114. P. 385–393.
- 4. Rodin A., Klimchuk A., Nadezhdinskiy A., Churbanov D., Spiridonov M. High resolution heterodyne spectroscopy of the atmosphere methane NIR absorption // Opt. Expr. 2014. V. 22. P. 13825–13834.

УДК 612.1/8, 617,7

Stereoscopic vision and its 3D testing

A.I. Milanich^{1,2}, Rohith Sasi^{1,3}

¹Moscow Institute of Physics and Technology (MIPT) ²Institute of General Physics Russian Academy of Science (IGP RAN) ³Amity University Dubai

1. Introduction

This article discusses new methods for human stereoscopic vision and the errors associated with 3D imaging. The word "stereo" comes from the Greek word "stereos" which means firm or solid. With stereo vision, you see an object as solid in three spatial dimensions-width, height and depth-or x, y and z. It is the added perception of the depth dimension that makes stereo vision so rich and special. Many day today activities like throwing a ball, driving etc depend on around 3D vision. So it is important to make sure both our eyes are working in coordination and give us the best results.

Many workers like professional drivers, or pilots of planes, must have a very good 3D vision, but till now we hadn't instruments for its objective testing.

So we have devised some simple tests for testing the errors in human stereoscopic vision. **2. Method**

There are about not much reliable methods or results [1] for studying human's eyes and its working, so we use own developed software for experiments. Java software forms the core part of this experiment as the application for testing patients has been developed in JAVA by Rohith Sasi. By using JAVA we make our software independent from a type and platform of a computer.

The idea of the test is developed and supervised by Prof Alexander Milanich. For our experiments we used standard 3D Samsung monitor S27A950D with active glasses and carried out simulations of errors in stereogram by special software developed in our laboratory. All experiments were done with assistance of students from MIPT (MIPT is Russian Government University).

2.1 Application to determine the distance at which one loses his stereoscopic perception.

For this we have developed a java application that runs in 3D. The application displays a rotating 3D cube on the computer screen and the person getting tested is asked to keep on increasing the distance of the cube much into the screen. Near to the cube we placed an object and we can varying the distance to the cube and to this object. At a certain point it is noticed that the person cannot say what is nearer the cube or the object. From the basic principles in optometry [2] it must be near 6 m, but we saw some deviations from student to student. Currently the testing going on results will be published soon.

2.2 Rotation of deformed cube (dynamic deformations)

We also studied the range of possible deformations in moving stereogram or dynamic deformations.

For that on a retina of one eye we send an image of deformed cube and on a retina of another eye an image of normal, correct cube. As a measure of deformation we use a ratio of length of one or several deformed edges in a cube to the length of its normal edge (see Fig. 2 left). The maximal value for dynamic deformation corresponds to disappearing of stereoscopic effect for the rotating cube.

We check up dependences of on the maximal value of deformation from cube's edge, its color and from the frequency of cube's rotation. Fig. 2 right demonstrates the main results. In experiments with various types of deformations and different examinees, some common relations were observed.

As it was expected, the maximal deformations have some individual significance, both for each kind of a strain, and for each examinee. But it was unusual that the maximal deformation for any type of image does not depend on the color of the cube's edges.

From Fig. 2 right follows, that the possible deformation was increased with growth of frequency of rotation. This effect is easy to explain, because as the frequency of rotation increased

the stream of interpreting information to a brain decreased. Also we find that depending on rotation frequency the value of maximal deformations are slightly various for cases, when the image of deformed cube shown for the right or for the left eye. The maximal deformations have been always more, if the deformed cube was seen by the right eye, than in the case, when the same deformation was seen by the left eye (Fig. 2 right).

We suppose that this effect is due to a fact that for the examinees' left hemisphere of the brain is better advanced as they are students with main right hand (right-handed).

The hypothesis has found the experimental confirmation for the only one left-handed (with main left hand) examinee, because the opposite results were observed: the value of maximal deformations was more in case, when an image of deformed cube was sent in his left eye.

Obtained result allows making the important conclusion about the various contributions of hemispheres of our brain to processes of visual perception [3], but for full reliability, it is necessary to repeat similar experiments on a bigger number of the examinees.

3. Conclusions

In our experiments, we proposed and evaluated an improvement to the technique that we previously proposed [3] to estimate the positions of 3-D images that persons see. The error range of the improved technique was used leading to results of sight tests make possible draw the objective conclusions about some pathologies and deviations, diseases at work of a nervous system, and also to diagnose the predisposition to a number of diseases [4]. Therefore, creation of new techniques and new tests for study of sight represents large scientific and practical interest.



Fig. 2 Example of a stereogram with different types of deformations and main results

References

1. *Milanich A.I., Murakhanova N.R.* Possible deformation errors in 3D stereograms // 56 International scientific conference, Applied Optics, Moscow – Dolgoprudny – Zhukovsky. 2013. P. 117–119.

- 2. *Milanich A.I.* The Theoretical Limit to the Accuracy of Clinical Refraction Measurement // Measurement Techniques. 2008. V. 51. N 3. P. 317–319.
- Milanich A.I. Functional optometry // 5-th Troitsk conference «Medical physics and innovations in medicine» (TCMPh -5), Troitsk. 2012. V. 2. P. 101–103.
- Milanich A.I., Sasi R. Optometry Testing of Real Mind Processes // 59 International scientific conference, Applied Optics, Moscow – Dolgoprudny – Zhukovsky. 2016. P. 90–91.

УДК 537.8

О проверке твёрдой связи кулонова поля с источником заряда

С.В. Блинов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

О мгновенном распространении полевых воздействий в природе учёные спорят ещё с древних времён. В современной физике устоялась концепция, согласно которой ни один сигнал, несущий информацию, не может передаваться быстрее скорости света. Это согласуется со специальной теорией относительности, в которой скорость света является пределом для всех движений массивных тел. Если же предположить существование сверхсветовых сигналов, то это приведёт к множеству парадоксов теории релятивистского движения тел в пустоте.

Вместе с тем известны физические предположения и расчёты, которые оспаривают столь категоричный подход к описанию реальности (парадокс Эйнштейна–Подольского– Розена, мгновенная редукция фон Неймана волновой функции и т. д.). Несмотря на колоссальное количество экспериментов, подтверждающих ограничение скорости распространения волновых электромагнитных сигналов, многие вопросы нелокальной организации системы заряженных частиц по-прежнему являются открытыми. Здесь существенным оказывается вопрос о движении силового, кулонова поля при сопровождении заряженной частицы.

Предпосылкой для доклада является недавний эксперимент по измерению полей у пучков релятивистских электронов с субсветовой скоростью ($\gamma = 10^3$), проведённый известными итальянскими физиками в Национальной Лаборатории Фраскати [1, 2]. По выводу экспериментаторов, их измерения находятся в полном соответствии с предположением о жестком движении силового поля, т. е. о синхронизации бесконечного радиального поля Кулона $1/r^2$ с движущимся центром его сферической симметрии.

Представим ситуацию, когда классический точечный заряд пролетает (прямолинейно и с постоянной скоростью) мимо регистрирующего электрическое поле датчика в точке D на некотором расстоянии h от него (рис. 1).

Принимая за t = 0 момент пролета электрона рядом с датчиком (точка В на рис. 1, которую возьмём за начало системы отсчёта), найдём по формулам теории поля [3] зависимость показаний датчика $E_{\perp}(t)$ – значение электрического поля в перпендикулярном направлении по отношению к траектории частицы:

$$E_{\perp}(t) = \frac{he\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}{\left(\sqrt{h^2 + (vt')^2} + \frac{v^2t'}{c}\right)^3} = \frac{he\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}{R^3(t)\left(\sqrt{1 - \frac{v^2h^2}{c^2R^2(t)}}\right)^3}.$$
(1)

Эта величина достигает максимума, когда содержимое скобки в знаменателе минимально, то есть при $t'_{\rm max} = -h/c\sqrt{1-v^2/c^2}$, что соответствует $t_{\rm max} = 0$. Максимальное поле, регистрируемое датчиком, определяется для больших скоростей релятивистским фактором Лоренца:

$$E_{\perp}(t_{\max}) = \frac{e}{h^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$
 (2)

Максимальное электрическое поле действительно достигает максимума в момент наименьшего удаления электрона от датчика ($t_{max} = 0$), но это поле генерируется задолго до того, как релятивистский точечный заряд сблизился с датчиком ($t'_{max} = -h/c\sqrt{1-v^2/c^2}$).

Что будет, если после расчетного момента излучения максимального кулонова поля электрон просто не долетит до датчика? Например, электрон может экранироваться, поглотиться или резко замедлиться, но не пролететь в назначенное время мимо датчика (рис. 1). Если считать, что кулоново поле жёстко связано с заряженной частицей, то датчик ничего не зарегистрирует, так как электрон не пролетал мимо, а оставался на достаточно большом расстоянии от него.

Совсем иным будет результат для близкодействия, запускающего запаздывающие механизмы испускания радиально расходящихся кулоновых полей с конечной скоростью. После момента генерации электрического поля (точка A), которое потом зарегистрирует датчик (правильнее будет сказать максимального значения этого поля или пика поля), для датчика в мире близкодействия абсолютно не важно, что с точечной частицей будет происходить далее – она может и не пролетать вблизи датчика. Любое событие, произошедшее с электроном после момента генерации, не успеет повлиять на регистрацию датчиком пика электрического поля, которое электрон обеспечил заблаговременно (до столкновения в точке O). В теории точечных частиц с близкодействием все выходит довольно парадоксально – датчик зарегистрирует реальное поле, такое же, как и в ситуации, когда электрон пролетел бы рядом с датчиком, но сама заряженная частица возле датчика не пролетала.

Несмотря на явную парадоксальность совпадения измерений для физически разных ситуаций, данный мысленный эксперимент находится в полном соответствии с учебниками по классической теории поля, например [3]. Согласно этой теории кулоново поле точечного электрона можно считать жёстко связанным с ним лишь до тех пор, пока его вектор скорости не меняется. Изменение вектора скорости частицы будет, конечно, вести к изменению и окружающего её электрического поля. Но в концепции близкодействия такое изменение в бесконечной пространственной структуре элементарного поля произойдет не мгновенно, а будет распространяться из центра не быстрее скорости света. Тогда столкновение электрона со стенкой повлекло бы за собой изменение окружающего поля лишь внутри так называемого конуса будущего MON. Вне его (а датчик находится именно в этой области) распределение поля не должно искажаться внезапным столкновением частицы, что для наблюдений в области датчика имитирует дальнейшее прямолинейное движение заряда. Такое предсказание согласуется и с общеизвестной интерпретацией Фейнмана [4] – для расчета скалярного и векторного потенциалов в некоторой точке он предлагал рассматривать точечный заряд движущимся равномерно и прямолинейно в запаздывающий момент времени. А поскольку запаздывающие потенциалы зависят лишь от того, что «делает» заряд в предшествующие моменты времени, то такие потенциалы не должны зависеть от того, продолжает ли заряд свое движение с постоянной скоростью или ускоряется после момента генерации изучаемых полевых потенциалов.

Ниже приведена схема эксперимента, которая в принципе позволяет разрешить спор о дальнодействии или близкодействии кулоновских сил через жёсткое или запаздывающее сопровождение их центральной области.



Рис. 1. Схема эксперимента с препятствием для пучка электронов

Литература

- 1. De Sangro R., Finocchiaro G., Patteri P., Piccolo M., Pizzella G. // Eur. Phys. Jour. C. 2015. V. 73, P. 137.
- 2. De Sangro R., Finocchiaro G., Patteri P., Piccolo M., Pizzella G. // Eur. Phys. J. C. 2017. V. 77. P 75.
- 3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 2. Теория поля. М.: Наука, 1988. 512 с.
- 4. *Feynman R.*, Leighton R.B., Sands M.L. The Feynman Lectures on Physics. Addison-Wesley, Redwood City, 1989. V. 2. Ch. 21, 26.2.

УДК 523.9, 520

Анализ экспериментов по отклонению света гравитацией Солнца

А.И. Миланич

Московский физико-технический институт (государственный университет) Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

1. Введение

Данная публикация призвана осветить существующие проблемы классической теории гравитации и экспериментов по измерению отклонению света звезд гравитацией Солнца.

2. История экспериментов по отклонению света гравитацией

Эксперименты сэра Эддингтона по измерению отклонения света звезд во время солнечного затмения 1919 г. [1] стали первыми экспериментами по проверке общей теории относительности (ОТО), а их результаты были объявлены ее экспериментальным подтверждением. Но почти сразу выяснилось, что точность экспериментов Эддингтона 1,61" ± 0,3" [1] завышена и была недостаточна для столь категоричных утверждений [2].

При прохождении лучей света вблизи поверхности Солнца общая теория относительности Эйнштейна предсказала отклонение лучей на 1,75", а расчет И.Г. Зольднера [3] (в ньютоновском поле гравитации) предсказал в два раза меньшее значение – 0,87".

Трудности экспериментов с Солнцем осложняются блеском короны (см. фото в [1]). Кроме того, для точного определения смещения звезд из одной и той же географической точки на том же оборудовании необходимо выполнить контрольные снимки того же участка звездного неба с интервалом примерно полгода. Также достижение точности измерений лучше 1" требует не только высококлассной оптики, но и соблюдения ряда дополнительных условий. Так, в работе [4] использовались даже специально разработанные, более толстые фотопластинки.

Но для нас более существенно другое. Последующие в период 1919–1929 гг. после экспедиции Эддингтона эксперименты [5] хотя и давали значительный разброс углов смещения отдельных звезд, но в большинстве случаев экспериментально определенное

значение отклонения света у поверхности Солнца было достоверно больше предсказанных ОТО 1,75". Среднее отклонение экспедиций 1919, 1922 и 1929 гг. колебались от 2" до $2,2" \pm 0,1"$ [5]. Столь существенное для оптических измерений систематическое отклонение невозможно объяснить воздействием на фотон плазмы солнечной короны или рефракцией земной атмосферы.

Впервые этот факт был озвучен в работе [5]: «Результаты всех наблюдений с полной определенностью говорят, что отклонение светового луча при прохождении около Солнца больше, чем даваемое общей теорией относительности...». Следовательно, эксперименты по отклонению фотонов гравитацией нанесли удар как по классической теории гравитации Ньютона, так и по ОТО.

Другие эксперименты, например, эксперименты в радиодиапазоне по проверке общей теории Эйнштейна из данных по радиоинтерферометрии квазаров [6] пока не вызывают доверия.

Другие доводы в пользу ОТО, например смещение перигелия Меркурия, можно объяснить как конечной скоростью гравитационных волн [7], так и дополнительными членами в потенциале постньютоновской гравитации [8, 9], которые уходят еще ко времени А. Клеро. Поэтому правильная интерпретация экспериментов по отклонению фотонов гравитацией актуальна до сих пор.

3. Масса фотона и гравитационный потенциал

Сначала давайте определим, что такое масса фотона. Обратимся к определению массы в Wikipedia [10]: «Масса – физическая величина, определяющая инерционные и гравитационные свойства тела в ситуациях, когда его скорость много меньше скорости света». Как видно, разделяют два сорта масс – инерционную и гравитационную. Что понимать под инерционной массой, следует уточнить, поскольку скорость фотона неизменна. При этом, в гравитационном поле обратимо изменяется частота фотона, что подтверждено экспериментально [11]. В определение массы следует добавить еще и «энергетическую» массу, определяемую через энергию частицы или тела и соответствующую формуле

$$E = mc^2, \tag{1}$$

где в нашем случае E- энергия фотона, m-его масса и с-скорость света.

Кроме того, масса определена для «тела» и при скоростях «много меньше скорости света». Но любые тела состоят из материи, то есть из адронов, а фотон имеет принципиально другую структуру (без адронов), а его скорость постоянна и максимальна в природе. Таким образом, стандартное определение массы изначально непригодно для фотона, тем более никто не проверял эквивалентность (равенство) всех трех типов масс для фотона. Была проверена эквивалентность инерционной и гравитационной массы только для вещества [12] и этот принцип лег в основу ОТО.

Для частоты фотона в гравитационном поле [13] потенциал имеет прежний вид:

$$\hbar \Omega = \hbar \Omega_0 \exp(r_S/R), \qquad (2)$$
$$r_S = G^* M/c^2,$$

где \hbar – постоянная Планка, Ω , Ω_0 – конечная и начальная частоты света, G^* – гравитационная постоянная для фотона, R – расстояние до центра Солнца и r_S – параметр гравитации Солнца.

Формула для r_s по виду совпадает с половиной радиуса Шварцшидьда, но с иной, большей гравитационной постоянной G^* для фотона. С учетом того, что отклонение фотона превышает 2", гравитационная постоянная для фотона больше стандартной гравитационной постоянной примерно в 2,4 раза. Такое новое значение гравитационной постоянной $G^* = 2,4$ $G = 1,6\cdot10^{-10}$ H м²кг⁻² решает проблему расхождения теории ньютоновской гравитации с экспериментом.

4. Траектория движения фотона в поле гравитации

Можно записать уравнение закона сохранения момента количества движения фотона в центральном гравитационном поле:

$$a \hbar \Omega = \text{const} = a_0 \hbar \Omega_0, \tag{3}$$

здесь, помимо ранее обозначенных переменных, а – прицельное расстояние, а индекс 0 соответствует начальным параметрам фотона на бесконечности.

Сначала определим ближайшее расстояние d прохождения фотона около Солнца.

$$a m = d m_0 \exp(r_S/d) = a_0 m_0,$$
 (4)

где m₀ и m – массы фотона.

Поскольку радиус Солнца R равен 699 тыс. км, $r_s = G^*M/c^2 = 3,54$ км, то минимальное расстояние до поверхности Солнца будет на 3,54 км меньше, чем прицельное на бесконечности. В приближении гиперболического движения, угол отклонения а равен:

$$\alpha \sim 2 r_S / R = 7.08 / 699 \cdot 10^{-3} \sim 10.12 \cdot 10^{-6} = 2.09''$$
 (5)

5. Заключение

Таким образом, можно утверждать, что отклонение более двух угловых секунд противоречат выводам ОТО. В рамках классической теории гравитации Ньютона гравитационная постоянная для фотона отличается от гравитационной постоянной для массы обычной материи.

- Dyson F.W., Eddington A.S., Davidson C. A Determination of the Deflaction of Light by the Sun's Gravitational Field, from Observations Made at the Total Eclipse of May 19, 1919 // Phil. Trans. Roy. Soc. of London. Ser. A. 1920. V. 220. P. 291–333.
- 2. Брайан Г. Элегантная Вселенная // УССР. М., 2004. С. 59.
- 3. *Soldner, J.G.* Ueber die Ablenkung eines Lichtstrahls von seiner geradlinigen Bewegung, durch die Attraktion eines Weltkörpers, an welchem er nahe vorbei geht // Berliner Astronomisches Jahrbuch, 1804. P. 161–172.
- Михайлов А.А. Наблюдение эффекта Эйнштейна во время солнечных затмений // УФН. 1956. Т. 59(1). С. 51–66.
- 5. *Кушнир Ю.М., Фурсов В.С.* Новые наблюдения отклонения световых лучей в поле тяготения Солнца // УФН. 1932. Т. 12 (1). С. 159.
- 6. *Muhleman D.G., Ekers R.D., Fomalont E.B.* Radio Interferometer Test of the General Relativistic Light Bending Near the Sun // Phys. Rev. Lett. 1970. V. 24(24). P. 1377–1380.
- Gerber P. Die raumliche und zeitliche Ausbreitung der Gravitation // Z. Math. Phys. 1898. 43. P. 93–104.
- 8. Браун В. Материя, пространство и время // URL <u>http://teoriya-gravitacii.org/index.html</u>
- Epstein R., Shapiro Irwin I. Post-post-Newtonian deflection of light by the Snn // Phys. Rev. D. 1980 V. 22(12). P. 2947–2949.
- 10. Macca. Wikipedia // URL https://ru.wikipedia.org/wiki/Macca
- Pound R.V., Rebka Jr.G.A. Apparent weight of photons // Physical Review Letters. 1960. 4 (7).
 P. 337–341
- 12. *Руденко В.Н.* Релятивистские эксперименты в гравитационном поле //УФН. 1978. Т. 126(3). С. 361–401.
- Миланич А.И. Фотоны, закон сохранения энергии и не только // Инженерная физика. 2016. № 9. С. 81–85.

Виртуальные дисплеи: тенденции, оптические системы и проблемы

Чжэел Рю¹, А.Н. Путилин²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ² Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

1. Актуальность виртуальных дисплеев

Виртуальную реальность или «мир виртуальных объектов» иногда называют искусственной реальностью, электронной реальностью, компьютерной моделью реальности и т. д. В общем для киберсубъекта это некоторый искусственно созданный мир, в то время как в оптике виртуальное изображение является одним из ключевых и объективных понятий при описании оптических схем. Двойственность профессионального понимания виртуальности часто порождает химерические представления о быстроразвивающейся области оптических исследований – «Виртуальные дисплеи» (ВД).

Человек воспринимает информацию о внешнем мире с помощью органов чувств. Сознание обрабатывает информацию, получаемую органами чувств, и строит некоторый образ на ее основе. У человека есть 5 органов чувств, с помощью которых он получает информацию об окружающем его мире: зрение (75%), слух (13%), осязание (6%), обоняние (3%), вкус (3%) [1]. Информация, получаемая с помощью зрения и слуха, составляет наибольшую часть (88%). Эту информацию может частично передавать обычный дисплей. С развитием техники и технологии, обычный 2D дисплей перестал удовлетворять запросы пользователей, 3D-дисплеи, особенно голографические или с динамической генерацией ракурсов [2], во многом решают проблему.

Объективные тенденции в развитии дисплейных систем можно понять, анализируя следующие два примера из эволюции развития электронных устройств: 1) тенденция развития электронных устройств: размер устройства неуклонно уменьшается; 2) увеличение соотношения размера дисплея к размеру устройства *К*. Что дальше, когда *К* достигнет 1, ничего особенного, *К* продолжит увеличиваться, только ВД станет базовым элементом в следующем поколении носимых устройств.

2. Требование к оптическим схемам ВД

Отличие от обычных оптических систем для виртуального дисплея приемник излучения — глаз человека непосредственно интегрирован в оптическую схему, он двигается, чтобы видеть мир с высоким разрешением и создает информационный поток для обработки и построения 3D модели окружающей обстановки в мозгу зрителя. Это связано с физиологией глаза человека: у глаза человека максимальное разрешение в центре зрения, а на периферии сильно падает.

В докладе приводятся результаты исследования критических параметров ВД различных типов (поле зрения и разрешение) в зависимости от области применения такого типа дисплеев. Определение требуемых параметров (Еуе Вох, минимальный размер последнего элемента оптической системы) оптической системы ВД зависит от требуемых поля зрения и положения Еуе Вох ВД. Исследование показало, что увеличение поля зрения приведет к необходимости увеличения размера Еуе Вох (увеличение обоих параметров без ухудшения разрешения очень сложно выполнимо на практике).

В результате исследования было показано, что большинство разработанных, и экспериментально протестированных систем ВД оказывается неприемлемым для применения по критериям, связанным с приведенным анализом параметров ВД. Рассмотрены ограничения оптических схем, использованных в разработках Google glass, Pinlight display [3], retinal scanning display [4, 5], Microsoft HoloLens [6].

3. Классификация

Все текущие решения, представленные в экспериментальных конструкциях, можно разделить на два способа формирования и передачи изображения к глазу: 1) проекционные схемы; 2) ПВО, или световодные схемы. У каждого типа есть свои преимущество и

недостатки. Проекционная система позволяет формировать большое поле, но такая система имеет большие габариты. Для минимизации габаритов можно передавать изображение к глазу через планарный световод, где излучение распространяется благодаря полному внутреннему отражению и выводится из волновода решеточными устройствами связи [7]. Но угловая апертура изображения, которое можно передать через световод, ограничивается условием полного внутреннего отражения и требуемых габаритов световода, дополнительное ограничение световой эффективности возникает благодаря многократному взаимодействию светового пучка с решеточным устройством вывода излучения из волновода, необходимого для синтезирования большого выходного зрачка системы.

4. Заключение

Значительные исследовательские и материальные ресурсы все больше и больше сосредоточиваются к области ВД, увидев потенциал этой области. Но, к сожалению, до сих пор никто не смог разработать оптическую систему, которая позволяет удовлетворить все требования к оптическим системам для применения согласно запросам пользователя. Для перспективных схем построения ВД необходима инновационная база оптических элементов: технология производства неклассических (неосевых, асферических и дифракционных) оптических элементов, селективные покрытия, высокоразрешающие дисплеи, в том числе с фазовой модуляцией, компактные RGB источники света.



Рис.1. а – Тенденция развития электронных устройств, б – увеличение соотношения размера дисплея к размеру устройства *К*, в – виртуальный дисплей.

- 1. Aviation Instructor's Handbook: FAA-H-8083-9A, U.S. Department of Transportation, FEDERAL AVIATION ADMINISTRATION, Flight Standards Service.
- 2. Жирков А., Путилин А. <u>Трёхмерное видео с континуальным ракурсом: съёмка, модель и</u> отображение // Мир техники кино. 2013. № 29. С. 26–33.
- 3. *Maimone Andrew, Lanman Douglas, Rathinavel Kishore, Keller Kurtis, Luebke David, Fuchs Henry* Pinlight Displays: Wide Field of View Augmented Reality Eyeglasses using Defocused Point Light Sources.
- 4. *Mircea M. Bayer* Retinal Scanning Display: a Novel HMD Approach for Army Aviation, Proceedings Volume 4711, Helmet- and Head-Mounted Displays VII; (2002); doi: 10.1117/12.478873.
- Lanman Douglas, Luebke David Near-eye light field displays // Journal ACM Transactions on Graphics (TOG) – Proceedings of ACM SIGGRAPH Asia. 2013. V. 32 I. 6. Article No. 220, ACM New York, NY, USA, doi: 10.1145/2508363.2508366.
- Bernard C. Kress, William J. Cummings Optical architecture of HoloLens mixed reality headset // Proc. SPIE 10335, Digital Optical Technologies. 2017. 103350K (26 June 2017); doi: 10.1117/12.2270017; http://dx.doi.org/10.1117/12.2270017.
- 7. Интегральная оптика: пер. с англ. / под ред. Т. Тамира. М.: Мир, 1978. 344 с.

Секция теоретической физики

УДК 538.9

Термодинамические свойства J1-J2-J3 двумерной модели Гейзенберга

В.Э. Валиулин^{1,2}, А.В. Михеенков^{1,2,3}, А.В. Шварцберг¹, А.Ф. Барабанов³

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» ³Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН

Рассматривается модель Гейзенберга S=1/2 на двумерной квадратной решетке. Случай J1-J2 с учетом ближайшего и следующего за ним обменов изучен довольно детально (см., например, [1, 2] и ссылки там). Он служит для описания спиновой подсистемы ВТСП купратов и некоторых других слоистых магнетиков, а также дает базовый пример квантового фазового перехода. Введение же третьего обмена вызывает интерес по следующим причинам:

1. В классическом пределе *S* >> 1 начиная с третьего обмена на фазовой диаграмме, кроме обычных соизмеримых ферромагнитной, антиферромагнитной и полосатой (страйп) фаз, возникают три различные несоизмеримые геликоидальные фазы.

2. В классическом пределе S >> 1 в некоторых областях фазовой диаграммы (J2 = J1/2) индуцированные третьим обменом геликоиды появляются уже при J3 << J1, J2.

3. В квантовом пределе S = 1/2 в широких областях вокруг точек J2=+/-J1/2 фрустрация даже при T = 0 разрушает дальний порядок, что приводит к образованию неупорядоченной спин-жидкостной фазы. Ясно, что учет J3 существенен при выяснении структуры этой фазы.

4. Экспериментально обнаружены (пока немногочисленные) квазидвумерные соединения, в которых наблюдается несоизмеримая спиновая структура, однако объяснение через взаимодействие Дзялошинского–Мории невозможно. Альтернативным вариантом в таком случае является *J*1-*J*2-*J*3 модель Гейзенберга.

В работе использован квантовый сферически-симметричный самосогласованный подход, в котором строго соблюдаются теорема Мермина–Вагнера и узельный спиновый констрейнт. Рассматривается случай отличной от нуля температуры, когда дальний спиновый порядок в 2D невозможен.

Исследованы области доминирования различных типов ближнего порядка, в широком спектре параметров вычислены спин-спиновые корреляционные функции, структурный фактор, энергия, теплоемкость, корреляционная длина, спектры спиновых возбуждений и спиновая восприимчивость.

Продемонстрирована эволюция положения управляющей точки (максимума структурного фактора) и границ областей различного ближнего порядка в широком диапазоне обменных параметров. Обнаружены «следы» всех шести возможных при T = 0 упорядоченных фаз. Обнаружены области обменных параметров, в которых теплоемкость демонстрирует поведение «пик + плечо».

Литература

1. Михеенков А.В., Валиулин В.Э., Швариберг А.В., Барабанов А.Ф. // ЖЭТФ. 2015. 148, 514.

2. Mikheyenkov A.V., Shvartsberg A.V., Valiulin V.E., Barabanov A.F. // JMMM. 2016. 419, 131.

УДК 53

Квантовая теория поля в двух измерениях с нетривиальными граничными условиями

Л.Н. Астраханцев, Э.Т. Ахмедов

Московский физико-технический институт (государственный университет) Институт экспериментальной и теоретической физики

Работа посвящена квантованию двумерного массивного действительного скалярного поля в присутствии зеркала.

В работе были поставлены следующие задачи:

1. Вычислить коммутационные соотношения между полем и сопряженным импульсом в присутствии зеркала, двигающегося с постоянной скоростью.

2. Найти выражение для свободного гамильтониана через операторы рождения в случае зеркала, двигающегося с постоянной скоростью.

3. Вычислить квантовое среднее от недиагонального элемента тензора энергии-импульса в случае зеркала, двигающегося с постоянной скоростью.

Во всех трех случаях были получены неожиданные результаты.

Во-первых, если предположить, что операторы рождения и уничтожения подчиняются стандартной алгебре Гайзенберга, то коммутатор поля и сопряженного импульса не является каноническим. А именно, возникают граничные вклады. Это связано с отсутствием глобальной гиперболичности пространства-времени в присутствии идеальных зеркал (тех, что идеально отражают моды с любым импульсом), а также с редукцией в два раза степеней свободы по сравнению с ситуацией в отсутствие зеркала: грубо говоря, в присутствии идеального зеркала мы имеем моды, которые ведут себя только как синусы, а не как синусы и косинусы.

Помимо этого, наличие зеркала приводит к появлению новых типов особенностей в пропагаторах – наряду со стандартной особенностью, которая лежит на световом конусе, исходящем из источника, появляется новая особенность, лежащая на световом конусе, исходящем из зеркального изображения источника. Это обязательно приведет к необычному поведению в ультрафиолетовой области. Пока не совсем ясно, как работать с этой проблемой, так как не совсем ясно, как формально записать условие неидеального зеркала.

Во-вторых, в случае зеркала, двигающегося с постоянной скоростью, свободный гамильтониан недиагонален и явно зависит от времени, что обычно является сигналом того, что в системе должно происходить рождение частиц. Однако движение с постоянной скоростью является стационарным и не должно приводить ни к какому рождению. Оказывается, что линейная комбинация из операторов Гамильтона и импульса, которая отвечает за трансляции вдоль мировой линии зеркала, является диагональной и не зависящей от времени. То есть основное состояние именно этой комбинации удобно рассматривать при вычислении квантовых средних.

В-третьих, квантовое среднее недиагональной компоненты тензора энергииимпульса не равно нулю в случае зеркала, двигающегося с постоянной скоростью. Однако полученная величина для среднего спадает экспоненциально по мере удаления от зеркала, а потому не является потоком. Помимо этого, она стремится к нулю при стремлении к нулю как скорости зеркала, так и массы поля.

Все эти неожиданные наблюдения говорят о том, что даже в столь простой ситуации нестационарная квантовая теория поля является очень плохо изученным предметом. Не говоря уже о том, что в нестационарной квантовой теории поля петлевые поправки в корреляционные функции обычно не подавлены по сравнению с древесными вкладами. Наблюдение последнего факта и является конечной целью данной дипломной работы.

Литература

- 1. *Fulling S., Davies P.* Radiation from a moving mirror in two dimensional space-time. Conformal Anomaly // Proc.R.Soc.London.A348,393,1976.
- Gradshteyn I.S.; Ryzhik I.M. Tables of integrals, series, and products Boston, Mass, USA: Academic Press, 1994.
- 3. Birrell N.D.; Davies P.C.W. Quantum fields in curved space // CUP. 1982.
- 4. Akhmedov E.T. // JHEP. 2012. 1201, 066 (2012) [arXiv:1110.2257 [hep-th]].
- 5. Akhmedov E.T. // Phys. Rev. D. 2013. 87, 044049 (2013) [arXiv:1209.4448 [hep-th]].
- E.T. Akhmedov, Astrakhantsev N., Popov F.K. // JHEP. 2014. 1409, 071 (2014) doi:10.1007/JHEP09(2014)071 [arXiv:1405.5285 [hep-th]].
- Akhmedov E.T., Godazgar H., Popov F.K. // Phys. Rev. D. 2016. 93, N. 2, 024029 (2016) doi:10.1103/PhysRevD.93.024029 [arXiv:1508.07500 [hep-th]].

УДК 535.33

Электромагнитные поля и электрические токи в конденсированных средах

С.С. Волков^{1,2}, Н.Л. Пузевич¹, Ю.Е. Дмитревский², Т.И. Китаева², С.В. Николин², А.Б. Дюбуа², А.С. Сафошкин²

¹Рязанское высшее воздушно-десантное командное училище им. генерала армии В.Ф. Маргелова

²Рязанский государственный радиотехнический университет

Образование электрического тока в металлических проводниках объясняется в литературе формированием электрического поля в проводнике, по напряженности которого определяется сила, действующая на электроны проводимости F = eE, где e – заряд электрона, E – напряженность электрического поля в проводнике. Наличие электрического поля в проводнике объясняется избыточными зарядами на полюсах источника электродвижущей силы, создаваемыми сторонними силами. Такими считаются в гальванических источниках химические силы, а в индукционных генераторах силы вихревого электрического поля, создаваемого изменяющимся магнитным полем в соответствии со вторым уравнением Максвелла. Накопление зарядов на полюсах источника тока возможно только по емкостному принципу на поверхности проводников. В индукционных генераторах предполагаемая движущая сила – вихревое поле тоже не может проникать в металл. Это известно из практики экранировки от электромагнитного поля металлами. Исходя из этих и ряда других противоречий, проведены экспериментальные и теоретические исследования образования электрического тока в цепях с гальваническими источниками тока и с индукционными генераторами переменного тока.

В целях изучения природы электрического тока в цепях с галваническими элементами сотрудниками НИТИ (г. Рязань) выполнены исследования по определению состава одного внешнего моноатомного слоя поверхности электродов свинцово-кислотных аккумуляторов. Исследования показали, что следов химических реакций, создающих электронный обмен электродов с электролитом, достаточный для обеспечения работы аккумулятора, не обнаружены. Предполагаемая по общепринятому химическому механизму сульфатация поверхностей электродов составляет единицы процентов по истечении ресурса работы аккумулятора, является одним из процессов необратимой деградации электродов. При исследовании контактной разности потенциалов между разными материалами на воздухе, с диэлектриками, с сегнетоэлектриками и с электролитами нами установлено, что электрический ток в гальваническом элементе образуется в результате контактных явлений. Электродвижущей силой при этом являются силы электронного сродства, образующиеся на границе раздела между электродами или распределенные по границам раздела промежуточных между электродами материалов. Под силой сродства подразумевается сила нейтрального атома, притягивающая заряженную частицу, в частности, электрон. Между металлами силы сродства при контакте образуют

контактную разность потенциалов как результат перераспределения зарядов, то есть в результате протекания тока.

Нами показано экспериментально наличие электрического тока в процессе образования контактной разности потенциалов между двумя электрическинейтральными электродами. При соединении нейтральных проводников между ними происходит перераспределение электронов. Электроны из материала с малой энергией связи переходят в материал с большой энергией связи электронов в нем. С переходом электронов из одного электрода в другой происходит электрическая (электростатическая) зарядка на величину напряжения, равную разности электриче связи или, что то же самое, на величину разности работ выхода. Это напряжение называют контактной разностью потенциалов. Противоположное силам сродства действие контактной разности потенциалов приводит к прекращению перехода электронов. Контактная разность потенциалов работу не выполняет. Работа выполняется при образовании контактной разности потенциалов силами сродства. Электрическая емкость воздушного конденсатора мала, и ток образования контактной разности потенциалов измерить не удается. При размещении между пластинами конденсатора из разных материалов сегнетоэлектрика ($\varepsilon > 100\ 000$) ток зарядки пластин до контактной разности потенциалов возрастает до измеряемой величины.

Однако ток и электродвижущая сила конденсатора имеют спадающий характер, а ток гальванического элемента в процессе работы имеет почти неизменную величину и по окончании ресурса резко падает. Это обусловлено действием ионов электролита. При замыкании нейтральных пластин с электролитом между ними электроны электрода с малой работой выхода (назовем его отрицательным) переходят в электрод с большой работой выхода (назовем его положительным). Электроны образуют в соединительном проводнике ток. При этом отрицательный электрод с уходом электронов зарядится положительно, а положительный электрод с приходом электронов зарядится отрицательно. В электролите ионы оказываются в электрическом поле электродов. Положительные ионы будут перемещаться к положительному электроду, заряженному отрицательно и будут компенсировать отрицательную заряженность электрода. Отрицательные ионы будут двигаться к отрицательному электроду, заряженному положительно и тоже компенсируют зарядку электрода. Процессы заряжения электродов и нейтрализация заряда ионами электролита приходят в равновесное состояние, и ток во внешней цепи окажется постоянной величины во времени. Полное количество протекающего во внешней цепи заряда будет определяться количеством заряда ионов электролита. По исчерпании ресурса ток резко упадет.

Кроме вопроса об электродвижущей силе в источнике возникает вопрос о силе, которая движет электроны в электрической цепи по всему контуру. При нейтральных электродах электрического поля в проводниках нет. Обычно протекание тока объясняется наличием электрического поля в проводнике, создаваемого избыточными зарядами, разделенными электродвижущей силой. Надо заметить, что для объяснения накопления избыточных зарядов внутри проводника с подвижной электронной подсистемой и создания электрического (электростатического) поля физических механизмов не имеется. Нарушение зарядового состояния внутри проводника приведет к разрушению металла.

Единственным видом электрической зарядки является емкостная зарядка с накоплением зарядов исключительно на поверхности. Емкостная зарядка полюсов источника или проводников, распределенная вдоль по длине, не способна по мощности обеспечивать существующие электрические токи. Мгновенная передача силового действия электродвижущей силы с границы раздела электродов по контуру со скоростью электромагнитных процессов указывает на прямое кулоновское взаимодействие электронов проводимости друг с другом.

Такое взаимодействие между электронами при расстоянии между ними в среднем 3 Å возможно только при посредничестве атомов решетки по следующей схеме. Валентные электроны металла не отрываются от атомов, а находятся при атомах. Средняя энергия связи электронов составляет около 4 эВ, а внешние возбуждающие факторы имеют энергии в пределах 3/2 кТ (0,03 эВ). Такие энергии недостаточны для удаления электрона от атома. Электроны движутся по орбитам согласованно с электронами соседних атомов.

Сжимаемость или растягиваемость электронных оболочек можно оценить по механической твердости металла. Потенциалы взаимодействия электронов и атомов (ионов) жесткие. Из экспериментов следует, что они на порядки жестче теоретических потенциалов.

Всякое силовое действие на валентный электрон в такой системе передается на всю подвижную, но несжимаемую в пределах решетки электронную подсистему, состоящую из электронных орбиталей атомов. Это обеспечивается силовой связью валентного электрона с атомом. В такой модели протекания электрического тока силовое воздействие электродвижущей силы, возникающей на границе раздела, передается по жесткой подвижной электронной подсистеме по всему контуру независимо от его геометрических размеров. Так как средняя скорость электронов при максимальных плотностях тока небольшая и составляет порядка 50 мкм/с, то при такой дрейфовой скорости электрон проходит расстояние в размер атома за 10^{-6} с. При частоте оборотов электрона вокруг ядра 10^{12} об/с процесс протекания тока будет выражаться в переходе электрона от атома к атому через 10^6 оборотов вокруг атома. Из простой оценки следует, что при протекании электрического тока состояние атомной решетки остается стационарным. Зарядовые флуктуации составляют в пределах 10^{-6} доли от стационарного состояния. При этом обеспечивается максимально допустимое токопрохождение через проводник.

Исследования с индукционными генераторами показали, что движущую силу в области обмоток генератора, действующую на электроны проводимости, создает вторичное магнитное поле, создаваемое вихревым электрически полем. Ток во внешней цепи обеспечивается кулоновским взаимодействием валентных электронных орбиталей атомов при связанности электронов с атомами и возможности свободного перехода от атома к атому.

УДК 621.315.592

Температурные зависимости времени электрон-электронных взаимодействий в полупроводниковых гетероструктурах

Н.С. Виноградов¹, А.Б. Дюбуа¹, А.Н. Конюхов¹, С.И. Кучерявый², С.Н. Машнина¹, А.С. Сафошкин¹

¹Рязанский государственный радиотехнический университет ²Обнинский институт атомной энергетики НИЯУ МИФИ

Работа направлена на выяснение вклада внутриподзонной и межподзонной электрон-электронной релаксации в затухание квантования Ландау осцилляций поперечного магнитосопротивления. Для сильнолегированного гетероперехода, аппроксимированного треугольным потенциальным профилем, когда заполнены основная и возбужденная подзоны размерного квантования, получены выражения параметрических зависимостей от температуры, которые объясняют экспериментальные зависимости [1].

Рассмотрим процесс взаимодействия частиц с импульсами \mathbf{k} и \mathbf{p} . В результате взаимодействия получаются частицы с импульсами $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ и $\mathbf{p} - \mathbf{q}$. Вероятность такого процесса пропорциональна интегралу столкновений:

$$\sum_{\mathbf{k},\mathbf{p}} \delta \left(E_{j} \left(\mathbf{k} + \mathbf{q} \right) + E_{l} \left(\mathbf{p} - \mathbf{q} \right) - E_{i} \left(\mathbf{k} \right) - E_{k} \left(\mathbf{p} \right) \right) f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{p}} \left(1 - f_{\mathbf{k} + \mathbf{q}} \right) \left(1 - f_{\mathbf{p} - \mathbf{q}} \right), \tag{1}$$

где f — функция распределения Ферми–Дирака. Индексы i, j, k, l обозначают следующее: электрон, находящийся в состоянии i взаимодействует с электроном в состоянии k, в результате чего происходят переходы соответственно в состояния j и l. С точностью до второго члена разложения внешнего возмущающего потенциала теории возмущений выражение для времени электрон-электронного взаимодействия может быть представлено в виде

$$\frac{1}{\tau_{ij}^{ee}} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_{k,m} \sum_{\mathbf{q}} \left| V_{tot}^{ijkl}(\mathbf{q},\omega) \right|^2 \sum_{\mathbf{k},\mathbf{p}} \delta \left(E_j \left(\mathbf{k} + \mathbf{q} \right) + E_l \left(\mathbf{p} - \mathbf{q} \right) - E_i \left(\mathbf{k} \right) - E_k \left(\mathbf{p} \right) \right) \times \\
\times f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{p}} \left(1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right) \left(1 - f_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} \right),$$
(2)

где $V_{tot}^{ijkl}(\mathbf{q},\omega)$ – матричный элемент полного потенциала экранирования. В ряде экспериментальных работ по исследованию особенностей осцилляций поперечного магнитосопротивления Шубникова–де Гааза (ШдГ) в широком диапазоне температур и магнитных полей для объемных 3D- и двумерных 2D-электронов обнаружены некоторые аномалии, имевшие определенную общность в качественном сходстве, но и существенные различия. Например, была обнаружена осциллирующая зависимость температуры Дингла, а следовательно и времени малоугловой релаксации, от температуры [2]. Эти осцилляции были обнаружены для сильнолегированных гетеропереходов ($n_s > 8.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$), в которых заполнена основная и вторая возбужденная подзона размерного квантования. Была установлена однозначная связь этих аномалий с сильным (для вырожденных 3D- и 2D-электронов) электрон-электронным взаимодействием.

Для качественного и количественного объяснения наблюдаемых эффектов необходимо рассмотрение каналов электрон-электронных взаимодействий в сложной системе 2D-вырожденных электронов. Окончательные зависимости времени электрон-электронного взаимодействия рассчитывались в соответствии с правилом Маттиссена.

В [3] представлено сравнение экспериментальных и рассчитанных кривых времени разрушения квантования Ландау для нескольких гетероструктур в которых заполнены только две нижние зоны размерного квантования. Можно отметить, что при низких температурах (T < 5K) затухание квантования Ландау определяется n_s -электронами, а численный анализ разложения поляризационных функций показывает появление немонотонностей $\tau_{ee}^{th}(T,n_s)$ при $n_m > 8 \cdot 10^{11}$ см⁻² и T > 5K. Это позволяет утверждать, что характерные осцилляции $\tau_{ee}^{th}(T)$ возникают только после заполнения электронами второй подзоны размерного квантования и отклика на температурное воздействие при T > 5K. Второй результат – это роль n_n -сателлита в возбуждении осцилляций, при этом независимо от того, какой компонент 2D-электронной системы воспринимает возмущение. Непосредственно это видно, если предположить $n_n = 0$, и тогда только $\tau_{mm}^{intra}(T)$ и $\tau_{dd}^{intra}(T)$ будут отличаться от нуля, и осцилляции $\tau_{ee}^{ee}(T)$ при T < 5K связаны только с внутриподзонными переходами. При более высоких температурах реализуется смешанный механизм разрушения квантования Ландау:

$$\tau_{q}^{\exp}(T) \approx \tau_{ee}^{(3)} \left[\left(\tau_{ee}^{mn} \right)^{-1} = \left(\tau_{mm}^{\text{intra}} \right)^{-1} + \left(\tau_{mm}^{\text{inter}} \right)^{-1}; \left(\tau_{ee}^{nd} \right)^{-1} = \left(\tau_{nn}^{\text{intra}} \right)^{-1} + \left(\tau_{nd}^{\text{inter}} \right)^{-1} \right].$$

Для сильнолегированного гетероперехода, аппроксимированного треугольным потенциальным профилем, когда заполнены основная и возбужденная подзоны размерного квантования, получены выражения параметрических зависимостей от температуры, которые объясняют результаты эксперимента [4, 5].

- Аверкиев Н.С., Монахов А.М., Саблина Н.И., Коепгаад Р.М.: Об обработке экспериментальных данных по осцилляции магнетосопротивления в двумерном электронном газе // Физика и техника полупроводников. 2003. Т. 37, вып. 2. С. 169–172.
- 2. Пайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей. М.: Мир, 1967. 382 с.
- 3. Дюбуа А.Б., Зилотова М.А., Кучерявый С.И., Сафошкин А.С. Кинетические процессы в умеренно легированном гетеропереходе // Вестник РГРТУ. 2013. № 3(45). С. 88–92.
- 4. Ambartsumyan V.A., Andryushchenko E.A., Bukhenskyy K.V., Dubois A.B., Dvoretskova E.A., Gordova T.V., Kucheryavyy S.I., Mashnina S.N., Safoshkin A.S. Channels of electron-electron

interactions in highly doped heterojunction $\prime\prime$ Nanosystems: physics, chemistry, mathematics. 2014. V. 5, I. 3. P. 343–353.

- Bukhenskyy K.V., Dubois A.B., Gordova T.V., Kucheryavyy S.I., Mashnina S.N., Safoshkin A.S. Electron-electron interactions in highly doped heterojunction // Physics Procedia. 2015. V. 71. P. 359– 363.
- A V Baskakova, K V Bukhenskyy, A B Dubois, S I Kucheryavyy, S N Mashnina and A S Safoshkin Kinetic processes in heavily doped semiconductor heterojunctions // Journal of Physics: Conference Series. 2016. V. 747, N 1. 012026.

УДК 621.315.592

Дифракция электромагнитной волны на квантовой структуре

А.Б. Дюбуа¹, А.Н. Конюхов¹, С.И. Кучерявый², С.Н. Машнина¹, В.В. Потапова¹, А.С. Сафошкин¹

¹Рязанский государственный радиотехнический университет ²Обнинский институт атомной энергетики НИЯУ МИФИ

В работе рассмотрен процесс дифракции ТМ-поляризованной электромагнитной волны гауссова пучка на МДП (металл–диэлектрик–полупроводник) структуре с учетом нелинейности диэлектрической проницаемости полупроводниковой пленки. В рамках теории развит модовый метод расчета процесса взаимодействия излучения со структурой, позволяющий рассчитывать для фиксированного потока энергии возмущения потоки энергий возникающих в процессах дифракции.

Процессы перераспределения энергии в результате дифракции электромагнитного излучения в диэлектрических средах представляют собой одну из важнейших задач интегральной оптики. По сравнению с процессами распространения электромагнитного излучения вдоль многослойных структур с параллельными (или коаксиальными) границами раздела, которые хорошо изучены и систематизированы к настоящему времени [1, 2, 8], дифракционные задачи изучены гораздо слабее. Основная проблема заключается в больших математических сложностях, связанных с решением уравнений Максвелла в средах, где границы раздела между средами суть непараллельные плоскости. Условия непрерывности в совокупности с уравнениями Максвелла для таких задач связаны с решением сложных интегродифференциальных уравнений [3], которые имеют аналитическое решение только для определенных геометрий [4]. В работе произведен расчет процесса отражения гауссова пучка с возбуждением поверхностных и объемных электромагнитных полей в структуре, где уже при относительно небольших напряженностях электромагнитного поля нелинейность в диэлектрической проницаемости будет сказываться на процесс отражения от нелинейной структуры. Последний четыре представляет собой области, характеризующиеся диэлектрическими проницаемостями: ε_1 – вакуум, $\varepsilon_2(\omega)$ – металл, ε_3 – тонкая полупроводниковая нелинейная пленка, ε_4 - диэлектрик (рис. 1).

Уравнения Максвелла:

$$i\omega \mathbf{H} = c \operatorname{rot} \mathbf{E} \,\mathbf{\mu} \, i\omega \varepsilon_i(\omega) \mathbf{E} = -c \operatorname{rot} \mathbf{H} \tag{1}$$

в декартовой системе в совокупности с гармоническим характером распространения каждой моды вдоль оси $X \{H(x,z), E(x,z)\} = \{H(z), E(z)\} \exp(ik_x x)$ связывают компоненты мод ТМ-поляризованного излучения (E_x, E_z, H_y) следующим образом: $\mathcal{E}_x(x,z) = \frac{ic}{\omega \varepsilon_i} \frac{\partial H_y}{\partial z}$; $\mathcal{E}_z(x,z) = \frac{ic}{\omega \varepsilon_i} \frac{\partial H_y}{\partial x}$; $E_x(z) = \frac{ic}{\omega \varepsilon_i} \frac{dH_y}{dz}$; $E_z(z) = -\frac{c}{\omega \varepsilon_i} k_x H_y(z)$, что легко получить из (1), учитывая планарность задачи [8]. Огибающие моды H(z), а также волновое число k_x определяются из волнового уравнения и граничных условий. Волновое уравнение вытекает из (1) и дает зависимость поля $H_y(z)$ для каждого из квадрантов:

$$\frac{d^2 H_y}{dz^2} + \left[\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_i - k_x^2\right] H_y = 0$$
⁽²⁾

с граничными условиями $H_y(z=-0) = H_y(z=+0)$, $E_x(z=-0) = E_x(z=+0)$, которые полностью определяют структуру каждой моды при x < 0 и x > 0.

Падающее и отраженное излучение может быть записано в виде

$$\mathcal{H}_{1y}(x,z) = \int_{0}^{\infty} \left[I_{\beta}^{+} H_{1y}^{\beta^{+}} + I_{\beta}^{-} H_{1y}^{\beta^{-}} \right] \exp\left(ik_{x}^{(1)}x\right) d\beta, \qquad (3.1)$$

$$\mathcal{H}_{1y}(x,z) = \int_{0}^{\infty} \left[R_{\beta}^{+} H_{1y}^{\beta^{+}} + R_{\beta}^{-} H_{1y}^{\beta^{-}} \right] \exp\left(-ik_{x}^{(1)}x\right) d\beta , \qquad (3.2)$$

где I_{β}^{\pm} и R_{β}^{\pm} – амплитуды падающей и отраженной волн. Падающее излучение можно определить из предпоследнего уравнения. Для этого представим магнитное поле как $\mathcal{H}(x,z) = G(z) \exp(-ik_x x)$, где $G(z) = C_0 / (1 + z^2 / W_0^2)$, а C_0 и W_0 – параметры пучка. С учетом вышесказанного умножим (4.1) сначала на $E_{1z}^{\beta^+}(z)$, затем на $E_{1z}^{\beta^-}(z)$ и по очереди проинтегрируем по z. Принимая во внимание условия ортогональности и нормировки, получаем: $\int_{-\infty}^{\infty} G(z) E_{1z}^{\beta^\pm} dz = -\frac{c}{\omega} k_x^{(1)} I_{\beta}^{\pm}$.

Полученные результаты должны удовлетворять закону сохранения энергии [5]: $P^i = P^R + P^T + P^{sp}$, где P^i – падающее излучение, P^R – отраженное объемное излучение, P^T – прошедшее излучение и P^{sp} – поток поверхностного поляритона. То есть должно выполняться равенство

$$\int_{0}^{\infty} (2I_{\beta}I_{\beta}^{*} - R_{\beta}^{+}R_{\beta}^{+*} - R_{\beta}^{-}R_{\beta}^{-*})k_{x}^{(1)}d\beta = TT^{*}k_{s} + \int_{0}^{\infty} T_{\beta}T_{\beta}^{*}k_{x}^{(2)}d\beta,$$

которое в совокупности с законом Френеля [6] является критерием истинности полученных результатов.

Рассмотренные в статье процессы дифракции электромагнитного излучения в пассивной волноведущей среде относятся к той ситуации, когда нелинейные добавки к диэлектрической проницаемости малы настолько, что процессы дифракции практически не зависят от интенсивности полей и их расчет основывается на линейной модели.



Рис. 1. Схема дифракции при нормальном падении ЭМ-волны на диэлектрический барьер

Литература

- 1. Маркузе Д. Оптические волноводы / пер. с англ., под ред. В.В. Шевченко. М.: Мир, 1974.
- 2. *Нефедов Е.И.* Дифракция электромагнитных волн на диэлектрических структурах. М.: Наука, 1978.
- 3. *Петров Д.В.* // Квантовая электроника. 1974. 1(2). 329.
- 4. Шевченко В.В. Плавные переходы в открытых волноводах. М.: Наука, 1978.
- 5. Агранович В.М., Кравцов В.Е., Лескова Т.А. // ЖЭТФ. 1981. 81(11). С. 1828.
- 6. Voronko A.I., Klimova L.G., Shkerdin G.N. // Solid State Comm. 1987. 6. P. 361.
- 7. Поверхностные поляритоны / под ред. В.М. Аграновича, Д. Миллса М.: Наука, 1986.
- 8. Дюбуа А.Б., Зилотова М.А., Кучерявый С.И., Сафошкин А.С. Кинетические процессы в умеренно легированном гетеропереходе // Вестник РГРТУ. 2013. № 3(45). С. 88–92.

УДК 530.1

Динамический эффект Казимира и секулярно растущие петлевые поправки

С.О. Алексеев, Э.Т. Ахмедов

Московский физико-технический институт (государственный университет) Институт теоретической и экспериментальной физики

В научном сообществе общепринятой является точка зрения, согласно которой излучение неинерциально движущегося зеркала всеобъемлюще описывается в квазиклассическом приближении [1, 2]. Цель данной работы заключается в том, чтобы показать, что в теории с взаимодействием это не так – учет петлевых поправок к корреляционным функциям приводит к возникновению в них (и, как следствие, в плотности потока энергии) секулярно растущих вкладов, что связано с нестационарностью гамильтониана. В действительности, в теории конденсированного состояния, например, такое явление представляет собой ситуацию общего положения [3, 4]. Оно также наблюдается в квантовой теории поля в пространстве де Ситтера [5], в скалярной электродинамике на фоне сильных электрических полей [6] и в квантовых поправках к излучению Хокинга [7].

Системы с нестационарными гамильтонианами мало изучены в контексте квантовой теории поля. В то же время физика таких систем может кардинально отличаться от того, что мы привыкли видеть. Нестационарность влечет за собой отсутствие однородности по времени, что приводит, в частности, к нарушению закона сохранения энергии. В результате могут происходить такие процессы, которые иначе были бы запрещены, например рождение частиц. Во взаимодействующих теориях нестационарность приводит к возникновению секулярно растущих петлевых поправок к пропагаторам. Это означает, что даже если константа взаимодействия мала, то петлевые поправки к физическим величинам становятся сравнимыми с древесным результатом по прошествии достаточного большого времени. Чтобы понять физику секулярно растущих вкладов, необходимо просуммировать лидирующие поправки, идущие из всех петель. Для рассматриваемой в данной работе системы вопрос пересуммирования остается открытым: нам известно, как оно производится, только в массивном случае, когда растут со временем только поправки к двухточечным корреляционным функциям, причём двухпетлевая поправка растет по времени линейно. В данной же задаче ситуация сильно усложняется: как показано в работе, помимо того, что двухпетлевые поправки к пропагаторам растут не как первая степень времени, секулярно растут также поправки и к высшим корреляторам.

Основная часть нашей работы [8] посвящена подробному вычислению петлевых поправок к пропагатору Келдыша (и, как следствие, к плотности потока энергии) в двумерной безмассовой теории скалярного поля, удовлетворяющему нулевому граничному условию (условию Дирихле) на произвольной времениподобной кривой в пространствевремени. Также работа содержит частичное вычисление петлевых поправок к четырехточечному коррелятору. Показано, что в теории с взаимодействием $\lambda \phi^4$ петлевые поправки растут со временем, что может привести к существенному изменению результата для потока, полученного в древесном приближении. Чтобы до конца понять влияние этого эффекта, необходимо просуммировать лидирующие поправки, идущие из всех петель, как это было сделано в уже упомянутых выше случаях скалярной теории поля в пространстве де Ситтера и скалярной электродинамики на фоне внешнего электрического поля.

Литература

- 1. *Birrell N.D., Davies P.C.W.* Quntum Fields in Curved Space Cambridge: Cambridge University Press, 1984.
- 2. Davies P.C.W., Fulling S.A. Radiation from a Moving Mirror in Two Dimensional Space-Time: Conformal Anomaly // Proc. Roy. Soc. Lond. 1976. V. 348. P. 393.
- 3. Landau L. D., Lifshitz E.M. Physical Kinetics, V. 10. Oxford: Pergamon Press, 1975.
- 4. *Kamenev A*. Many-body theory of non-equilibrium systems. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.
- Akhmedov E.T., Popov F. K., Slepukhin V. M. Infrared dynamics of the massive φ⁴ theory on de Sitter space // Phys. Rev. D. 2013. V. 88. 024021.
- 6. Akhmedov E.T., Astrakhantsev N., Popov F. K. Secularly growing loop corrections in strong electric fields // JHEP. 2014. V. 1409. 071.
- Akhmedov E.T., Godazgar H., Popov F. K. Hawking radiation and secularly growing loop corrections // Phys. Rev. D. 2016. V. 93. 024029.
- Akhmedov E.T., Alexeev S.O. Dynamical Casimir effect and loop corrections // Phys. Rev. D. 2017. V. 96. 065001.

УДК 539.196; 517.589

A periodic level-crossing two-state model of a general Heun class

G. Saget¹, A.M. Ishkhanyan², C. Leroy¹, T.A. Ishkhanyan^{1,2,3}

¹Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne, UMR CNRS UBFC, Dijon, France ²Institute for Physical Research of National Academy of Sciences of Armenia ³Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia

We present a specific constant-amplitude periodic level-crossing model of the semiclassical quantum time-dependent two-state problem that belongs to a general Heun class of field configurations [1]. The exact analytic solution for the probability amplitude, generally written in terms of the general Heun functions, in this specific case admits series expansion in terms of the incomplete Beta functions. Terminating this series results in an infinite hierarchy of finite-sum closed-form solutions each standing for a particular two-state model, which generally is only conditionally integrable in the sense that for these field configurations the amplitude and phase modulation functions are not varied independently. However, there exists at least one exception when the model is unconditionally integrable, that is the Rabi frequency and the detuning of the driving optical field are independent. This is a constant-amplitude periodic level-crossing model, the detuning for which in a limit becomes a Dirac delta-comb configuration with variable frequency of the level-crossings. We derive the exact solution for this model, determine the Floquet exponents and study the population dynamics in the system for various regions of the input parameters [2].

References

Ishkhanyan A.M., Shahverdyan T.A., Ishkhanyan T.A. Thirty five classes of solutions of the quantum time-dependent two-state problem in terms of the general Heun functions // Eur. Phys. J. D. 2015. V. 69, N 10.

^{2.} Saget G., Ishkhanyan A.M., Leroy C., Ishkhanyan T.A. A periodic level-crossing two-state model of a general Heun class // J. Cont. Phys. Arm. Ac. Sci. 2017. V. 52. N 4.

Об эквивариантных граничных задачах и энергетических уровнях водородоподобного атома с шаровым ядром

В.П. Бурский

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Дифференциальные операторы и уравнения, инвариантные относительно действий групп Ли, и их приложения широко известны (см., например, [1]), а теория инвариантных граничных задач делает только первые шаги. Доклад посвящён построению первых конструкций и изложению первых результатов в теории граничных задач для уравнений в частных производных, инвариантных относительно некоторого действия группы Ли, а также одному приложению в квантовой механике (см. работы [2, 4]).

Опишем схему построения теории на основе понятия расширения оператора, как это принято в общей теории граничных задач. Пусть G – некоторая группа Ли (в частности, дискретная), гладко действующая в замкнутой области $\overline{\Omega}$. Это означает, что имеется группа \tilde{G} диффеоморфизмов $U_g: \overline{\Omega} \to \overline{\Omega}$, $U_g x = g \cdot x$ области $\overline{\Omega}$ на себя, гладко зависящих от элемента группы G, и отображение $g \to U_g$ – гомоморфизм групп. При этом сужение диффеоморфизмов U_g на границу $\partial\Omega$ индуцирует гладкое действие группы G на границе $\partial\Omega$. Действие группы G на области $\overline{\Omega}$ порождает представление группы G в функциональных пространствах: $(gu)(x) = u(g^{-1}x)$ (гомоморфизм группы Gв группу обратимых операторов). Такое представление индуцируется на пространствах $C_0^{\infty}(\Omega), C^{\infty}(\Omega), H^m(\Omega), D'(\Omega), C^{\infty}(\partial\Omega)$ и других.

Пусть дифференциальная операция $L = \sum_{|\alpha| \le m} a_{\alpha}(x)D^{\alpha}$ инвариантна относительно действия группы G, то есть g(Lu) = L(gu). Тогда области определения максимального оператора D(L), минимального оператора $D(L_0)$, ядра ker L и граничного пространства $C(L) = D(L)/D(L_0)$ инвариантны относительно действия группы G. Если действие группы сохраняет ещё и объём области Ω , то скалярное произведение в пространстве $L_2(\Omega)$ инвариантно относительно действия группы G, и поэтому представление группы G в этом пространстве унитарно. В этом случае операция оператора L также инвариантна относительно действия группы G, для формально сопряжённой дифференциальной операции $L^+ \cdot = \sum_{|\alpha| \le m} D^{\alpha}(a_{\alpha}^*(x) \cdot)$ области определения максимального оператора $D(L^+)$, минимального оператора $D(L_0^+)$, ядра ker L^+ , граничного пространства $C(L^+)$ инвариантны относительно действия группы G.

Граничную задачу Lu = f, $\Gamma u \in B$ ($\Gamma : D(L) \to C(L)$ – отображение факторизации), порождённую подпространством $B \subset C(L)$, будем называть *G*-инвариантной, если пространство В инвариантно относительно указанного действия группы *G*. *G*-инвариантную граничную задачу будем называть эквивариантной, если ясно, какая группа действует.

Если группа G компактна (и непрерывна), то, как хорошо известно, гильбертово пространство представления группы разлагается в прямую сумму конечномерных инвариантных подпространств, в которых индуцируются неприводимые представления группы G. А если группа ещё и коммутативна, то неприводимые представления одномерны. Пусть пространством представления группы G является граничное

Если наша G-инвариантная граничная задача корректна, то в простых случаях разложение в прямую сумму $C(L) = C(\ker L) \oplus B$ влечёт разложения в прямую сумму $C^k = C^k(\ker L) \oplus B^k$.

с конечномерными проекторами $\Pi^k : C^k \to C^k$ (ker L) вдоль B^k и теперь проверка корректности G-инвариантной граничной задачи сводится к проверке двух свойств:

1) $\mathbf{C}^{k}(\ker \mathbf{L}) \cap \mathbf{B}^{k} = 0$, 2) $\exists \kappa > 0$, $\forall k$, $\left\| \Pi^{k} \right\|_{C^{k}} < \kappa$.

В работе мы применяем эту общую схему к исследованию общей эквивариантной граничной задачи в случае простой области, компактной абелевой группы и простого уравнения, в частности, описываем спектр оператора общей эквивариантной граничной задачи для уравнения Гельмгольца в круге и в шаре с группой SO(n), выявляя случаи нарушения корректности задачи, выражающиеся в нарушении свойства 1). При этом выполнение свойства 2) оказывается обеспеченным свойством корректности задачи для уравнения Пуассона. Здесь обеспечивается отмеченный выше (как простой случай) перенос разложения в прямую сумму, свойственного корректной граничной задаче, на прямые слагаемые разложения на инвариантные подпространства действия группы.

Приложением указанной конструкции является расчет спектра излучения и поглощения, а также нахождение соответствующих волновых функций водородоподобного атома с неточечным ядром. Рассмотрим уравнение Шредингера для водородоподобного атома с кулоновским потенциалом во внешности шара, в котором находится ядро, и поставим задачу о нахождении собственных значений и собственных функций оператора, заданного некоторой граничной задачей на сферической границе ядра, являющейся инвариантной относительно вращений. Мы получаем, в частности, что собственные значения оператора Шрёдингера, порождённого произвольной инвариантной граничной задачей, не зависят от выбора такой краевой задачи, и их значения такие же, как и для точечного ядра [3], т. е. в рамках этой модели спектр излучения и поглощения атома водородоподобного атома не изменяется при изменении размера ядра, но соответствующие волновые функции, естественно, другие. Отметим, что интерес к изучению влияния размера ядра атома на квантово-механические параметры связан, в частности, с появлением в 2010 году статьи об экспериментах с мюонным водородом. А именно, в статье 32 авторов, вышедшей В журнале «Nature», «Размер протона» (http://www.nature.com/nature/journal/v466/n7303/full/nature09250.html) опубликованы результаты по данным, которые показывают, что размер протона на 4% меньше, чем из расчетов квантовой электродинамики. В настоящей работе предполагаем, что заряд в ядре распределен сферически симметрично. Как известно со времён Ньютона, сферически симметричное тело за его пределами создает то же гравитационное поле, как и материальная точка той же массы, которая расположена в центре тела. Поэтому мы используем кулоновский потенциал, используя аналогию с гравитацией. Для случая точечного ядра обычно вводятся два ограничения на волновую функцию – решение уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом – это ограничение роста в нуле и исчезновения на бесконечности. В настоящей работе волновая функция не определена в окрестности нуля, вместо этого рассматривается граничная задача решения уравнения Шрёдингера во внешности сферы некоторого радиуса.

Мы не знаем, какие граничные условия должны быть размещены на поверхности ядра, но мы предполагаем, что они должны быть сферически симметричными. Это приводит к формулировке общей эквивариантной краевой задачи. Эта задача решена, получены явные формулы для собственных значений и функций, собственные функции записаны через функции Куммера (вырожденные гипергеометрические функции) и зависят от исходной эквивариантной граничной задачи, точнее, от двух последовательностей коэффициентов разложения функций, которые определяют граничную задачу и которые (в конечном числе, конечно) следует уточнять в экспериментах, если пытаться использовать эти явные формулы при расчётах облака вероятности нахождения электрона.

- 1. *Olver, P.J.*, Applications of Lie Groups to Differential Equations, Graduate Texts in Mathematics, Vol. 107, New York: Springer-Verlag, 1993. 513 p.
- Бурский. В.П. Методы исследования граничных задач для общих дифференциальных уравнений. — Киев: Наукова Думка, 2002. 315 с.
- 3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М: Наука, 1988. 512 с.
- Burskii V.P., Zaretskaya A.A. On the spectrum and eigenfunctions of the equivariant general boundary value problem outside the ball for the Schrodinger operator with Coulomb potential // Quantum Physics Letters. 2016. V. 5. N. 2. P.15 – 17 (arXiv:1707.04782).
Секция бионанофизики

УДК 53.088.6

Исследование возможностей улучшения точности калибровки установки малоуглового рентгеновского рассеяния

А.С. Казанцев¹, Ю.Л. Рижиков¹, Ю.С. Ковалёв^{1,2}, Д.В. Соловьёв^{1,2}, А.И. Иваньков², В.В. Чупин¹, А.И. Куклин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Объединённый институт ядерных исследований

Для решения большинства задач методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) необходимо с хорошей точностью калибровать используемую установку по шкале значений модуля вектора рассеяния, то есть находить коэффициент пересчёта реальных расстояний между пикселями детектора в $Å^{-1}$:

$$q = \frac{4\pi\sin\theta}{\lambda},\tag{1}$$

где q – модуль вектора рассеяния, Θ – половинный угол между волновым вектором исходного пучка и вектором рассеяния, λ – длина волны.

В настоящее время наиболее распространённым способом проведения такой калибровки является использование поликристаллических порошковых образцов с большим периодом повторяемости (30 Å и больше). Такими параметрами обладают алканаты серебра [1].

В работе использовались бегенат серебра и стеарат серебра с целью калибровки малоугловой части установки Ригаку (МФТИ, Долгопрудный) [2] с помощью дифракционных колец. Значения периодов повторяемости и тип решетки известен с высокой точностью [1, 3].

Как правило, на установке Ригаку применяется калибровка по дифракционному кольцу первого порядка кристаллического порошка бегената серебра. В данной работе исследовалась возможность использования для калибровки дифракционных колец последующих порядков при проведении измерений в ближней и дальней к детектору камерах. Для этого усреднённая по углу дифракционная картина интенсивности рентгеновского рассеяния аппроксимировалась суммой пиковых функций с целью определения координат центров дифракционных пиков с более высокой точностью. В процессе обработки учтена неидеальность формы детектора, фоновая составляющая и вычислена погрешность.

Аналогичная процедура проведена для смеси порошков бегената и стеарата серебра (рис. 1). Показано, что при измерении в дальней от детектора камере использование данной смеси даёт улучшение точности калибровки. Эффект такого же улучшения в случае измерения в ближней камере не достигается вследствие слияния дифракционных пиков различных веществ больших порядков и значительного уширения пиков малых порядков [4]. В таком случае для калибровки рекомендуется использовать один из алканатов.

Предложенные методы могут быть использованы на аналогичных установках МУРР в целях улучшения точности калибровки по шкале значений модуля вектора рассеяния.



Puc.1. Аппроксимация экспериментальных данных зависимости интенсивности от значений модуля вектора рассеяния (с учётом фоновой составляющей) суммой пиковых функций (гауссиан и лоренциан). Точками показаны экспериментальные данные, тонкими линиями – функции, аппроксимирующие отдельные дифракционные пики, толстой линией – аппроксимация всего набора данных суммой найденных пиковых функций. Обработка производилась в пакете Wolfram Mathematica 11.2

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (16-04-01264).

Литература

- Blanton T.N. [et al.]. JCPDS International Centre for Diffraction Data round robin study of silver behenate. A possible low-angle X-ray diffraction calibration standard // Powder Diffr. 1995. V. 10, N 2. P. 91–95.
- 2. *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, N 9–10. P. 1397–1402.
- Nyam-Osor M. [et al.]. Silver behenate and silver stearate powders for calibration of SAS instruments // J. Phys. Conf. Ser. 2012. V. 351.
- Казанцев А.С. [и др.]. Изучение допустимых параметров микрокристалла, определяемых с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния // 59 научная конференция МФТИ. 2016.

УДК: 577.322.54

Малоугловые рентгеновские исследования АТФ-синтазы, встроенной в нанодиски

А.В. Власов¹, Ю.Л. Рижиков¹, Н.М. Курбатов¹, А.И. Куклин^{1,2}, Н.А. Денчер¹, В.И. Горделий^{3,4}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Объединённый институт ядерных исследований

³Institut de Biologie Structurale J.-P. Ebel, Université Grenoble Alpes-CEA-CNRS, F-38000 Grenoble, France

⁴Institute of Complex Systems: Structural Biochemistry (ICS-6), Research Centre Jülich, 52425 Jülich, Germany

АТФ-синтаза – огромный мультисубъединичный фермент, катализирующий важнейшую биохимическую реакцию превращения АДФ в АТФ, молекулу, без которой невозможна биоэнергетика. Белки АТФ-синтазы из хлоропластов, встроенные в нанодиски впервые исследовались методами малоуглового рентгеновского и рассеяния (МУРР). Было показано, что АТФ-синтазы образуют димеры в нанодисках. PDB-модель димера F1Fo АТФ-синтаз (4B2Q) [1] была встроена в 3D ab initio форму низкого разрешения, полученную в результате обработки экспериментальных данных МУРР и МУРН.

Белок АТФ-синтаза из *Spinacia Oleracea* был выделен и очищен по протоколам, описанным в работах [2, 3]. Далее, белок был встроен в DMPC/DOPC MSP1E3D1 нанодиски, приготовленные по протоколу [4]. МУРР измерения проводились на установке bioSAXS beamline BM-29, ESRF, Гренобль, Франция. Обработка данных проведена с помощью программного пакета ATSAS и платформы ATSAS-online. Совмещение PDB-структур и формы низкого разрешения проведено в программе РуМОL.

Проведено сравнение с данными электронной микроскопии (TEM) [5]. Результаты, полученные из МУРР, PDB и TEM, показали хорошую самосогласованность, подтверждая димеризацию АТФ-синтазы в митохондриях, которая определяет зигзагообразную укладку внутренних мембран митохондрии (геометрию митохондриальных крист) [6]. Угол между белками, входящими в состав димера, составил приблизительно 90°. Получение функционального димера в нанодисках открывает перспективы для исследования структурно-функциональных изменений в условиях максимально приближенных к нативным. Настоящие результаты показывают возможность исследования взаимодействия субъединиц АТФ-синтазы и ее возможные взаимодействия с другими белками методами МУРР и МУРН, аналогичными для водорастворимых белков [7–9].

Мы благодарим программу «5ТОП100» за поддержку данной работы.

- Davies K. M., Anselmi C., Wittig I., Faraldo-Gómez J. D. and Kühlbrandt W. Structure of the yeast F1Fo-ATP synthase dimer and its role in shaping the mitochondrial cristae // Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 2012. V. 109. N 34. P. 13602.
- 2. *Pick U. and Racker E.* Purification and reconstitution of the N, N'-dicyclohexylcarbodiimide-sensitive ATPase complex from spinach chloroplasts // J. Biol. Chem. 1979. V. 254. P. 2793–2799.
- Seelert H., Poetsch A., Rohlfs M. and Dencher N. A. Dye-ligand chromatographic purification of intact multisubunit membrane protein complexes: application to the chloroplast H+-F0F1-ATP synthase // Biochem. J. 2000. V. 346. N 1.
- 4. *Bayburt T. H. and Sligar S. G.* Membrane protein assembly into Nanodiscs // FEBS Lett. 2010. V. 584. N 9. P. 1721–1727.
- Dudkina N. V., Heinemeyer J., Keegstra W., Boekema E. J. and Braun H.-P. Structure of dimeric ATP synthase from mitochondria: An angular association of monomers induces the strong curvature of the inner membrane // FEBS Lett. 2005. V. 579. N 25 P. 5769–5772.
- Dudkina N. V., Sunderhaus S., Braun H.-P. and Boekema E. J. Characterization of dimeric ATP synthase and cristae membrane ultrastructure from Saccharomyces and Polytomella mitochondria // FEBS Lett. 2006. V. 580 N 14. P. 3427–3432.
- Kuklin A. I., Murugova T. N., Ivankov O. I., Rogachev A. V, Soloviov D. V, Kovalev Y. S., Ishchenko A. V, Zhigunov A., Kurkin T. S. and Gordeliy V. I. Comparative study on low resolution structures of apoferritin via SANS and SAXS // J. Phys. Conf. Ser. 2012. V. 351. N 1. P. 12009.
- Murugova T. N., Vlasov A. V., Ivankov O. I., Rogachev A. V., Soloviov D. V., Zhigunov A., Kovalev Y. S., Ryzhykau Y. L., Zinovev E. V., Round A., Gordeliy V. I. and Kuklin A. I. Low resolution structural studies of apoferritin via SANS and SAXS: The Effect of concentration // J. Optoelectron. Adv. Mater. 2015. V. 17. N 9–10. P. 1397–1402.
- Vlasov A., Murugova T., Grudinin S., Ivankov O., Soloviov D., Rogachev A., Round A., Ryzhykau Y., Mishin A., Balandin T., Borschevskiy V., Gordeliy V. and Kuklin A. Protein structure and structural ordering versus concentration dependence // FEBS J. 2014. V. 281. N Supplement s1. P. 593.

Реализация лиганд-зависимых элементов булевой логики на основе ДНК-опосредованной самосборки наночастиц

А.В. Васильева¹, В.Р. Черкасов¹, М.П. Никитин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Важнейшим направлением современной биомедицины является разработка носителей для направленной доставки лекарственных средств, увеличивающих биодоступность и время циркуляции препарата в организме, а также специфичность его доставки к больным клеткам [1]. Для повышения специфичности доставки большой интерес представляет реализация систем-носителей, реагирующих на логическую комбинацию внешних молекулярных факторов для высвобождения лекарства [2].

Целью представленной работы было создание модельных «умных» носителей с помощью ДНК-опосредованной самосборки нано- и микрочастиц. В основу был положен подход к конструированию агентов направленной доставки лекарств, недавно предложенный и реализованный на белковых интерфейсах коллективом нашей лаборатории [3].

В рамках данной работы была создана модельная система, которая представляет собой комплекс из ДНК-модифицированных микро- и наночастиц, самособирающийся за счёт специфичных ДНК-ДНК взаимодействий. В случае наличия в растворе определенной комбинации входных сигналов (биомолекул), взаимодействующих с олигонуклеотидным интерфейсом, комплекс диссоциирует; в результате этого проходит ферментативная реакция, продукт которой регистрируется как выходной сигнал системы.

Для первичного исследования работы комплекса была исследована описанная система с простейшим вариантом ДНК-интерфейса для логической функции ДА. Было реализовано несколько различных вариантов ДНК-интерфейса для функции ДА. Далее с помощью описанного подхода были реализованы более сложные логические функции. На основе изучения их функционирования были сделаны выводы о подходах к дизайну ДНК-интерфейсов для наночастиц.

Литература

- Tibbitt M.W. [et al.]. Emerging Frontiers in Drug Delivery // J. Am. Chem. Soc. 2016. V. 138(3). P. 704–717.
- Evans A.C. [et al.]. Biocomputing nanoplatforms as therapeutics and diagnostics // J Control Release. 2016. V. 240. P. 387–393.
- 3. *Nikitin M.P.* [*et al.*]. Biocomputing based on particle disassembly // Nat. Nanotechnol. 2014. V. 9. P. 716–722.

УДК 577.29

Сбор и обработка данных в серийнной кристаллографии мембранных белков

Е.В. Марьин¹, А.П. Лугинина¹, А.Ю. Гусач¹, А.В. Мишин¹, К.В. Ковалёв^{1,2}, Д.Н. Забельский¹, В.И. Борщевский¹, В.Г. Черезов^{1,3}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Forschungszentrum Julich

³The Bridge Institute, Department of Chemistry, University of Southern California

Мембранные белки – ключевые функциональные компоненты клеточных мембран и важные объекты современной биологии. Они выполняют, в том числе, сигнальные и транспортные функции в живых организмах и составляют около 25% человеческого генома [1]. До 60% мишеней современных лекарств – мембранные белки [2]. Кроме того, они

нашли широкое применение в оптогенетике, отмеченной в 2010 году журналами Nature и Science методом года и десятилетия соответственно.

Благодаря развитию биохимических методов, а также совершенствованию методов кристаллизации [3], с недавних пор стало возможно изучение их структуры с атомарным разрешением. Получение структуры мембранных белков методом рентгеновской кристаллогнафии сильно ограничено из-за радиационного повреждения. На данный момент при невозвожности вырастить кристаллы достаточного размера широко применяется метод серийной синхротронной кристаллографии. Кроме того, в 2011 году был предложен метод серийной фемтосекундной кристаллографии [4], позволяющий собирать структурные данные без традиционного радиационного повреждения при использовании лазеров на свободных электронах.

В данной работе получены наборы данных серийной фемтосекундной и серийной синхротронной кристаллографии. Сравнивается методика эксперимента и особенности обработки данных, полученных разными методами. В случае синхротронной кристаллографии обсуждается создание полностью автоматизированной системы для обработки данных.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (RFMEFI58716X0026).

Литература

- 1. *Wallin E., von Heijne G.* Genome-wide analysis of integral membrane proteins from eubacterial, archaean, and eukaryotic organisms // Protein Sci. 1998. V. 7. N 4. P. 1029–1038.
- 2. Overington J.P., Al-Lazikani B., Hopkins A.L. How many drug targets are there? // Nat. Rev. Drug Discov. 2006. V. 5. N 12. P. 993–996.
- 3. *Ehud M. Landau J.P.R.* Lipidic cubic phases: A novel concept for the crystallization of membrane proteins // Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. National Academy of Sciences. 1996. V. 93. N 25. P. 14532.
- 4. *Chapman H.N.* [*et al.*] Femtosecond X-ray protein nanocrystallography // Nature NIH Public Access. 2011. V. 470. N 7332. P. 73.

УДК 577.322.63

Рентгеноструктурный анализ цитохромов Р450

С.С. Бухдрукер¹, Е.В. Марьин¹, М.Б. Шевцов¹, М.Н. Кадукова¹, К.В. Ковалев¹, П.А. Попов¹, С.В. Грудинин², Н.В. Струшкевич³, А.А. Гилеп³, В.И. Борщевский¹

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Inria, Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, LJK, Grenoble, 38000, France ³Институт биоорганической химии НАН Беларуси

Цитохромы – мембранные белки, которые содержат гем в качестве кофактора. Биологическая функция цитохромов заключается в переносе электронов посредством обратимого изменения валентности атомов железа, входящих в состав гема. В зависимости от простетической группы цитохромы бывают четырех видов: а (железо-формил-порфирин), b (протогем), с (замещенный мезогем) и d (железо-дигидропорфирин).

Цитохром P450 относятся к цитохромам типа b. Число 450 обозначает, что связанный с монооксидом углерода цитохром имеет максимум поглощения при длине волны 450 нм. Цитохромы P450 обнаружены почти во всех живых организмах, в том числе и в Homo sapiens. В теле человека цитохромы выполняют широкий спектр функций: они участвуют в окислении многочисленных соединений, играют огромную роль в обмене стероидов, желчных кислот, а также в нейтрализации ксенобиотиков. Последнее следует учитывать при разработке лекарственных препаратов, так как многие действующие вещества являются инородными для нашего организма. [1]

Рентгеноструктурный анализ является одним из наиболее важных подходов к исследованию цитохромов Р450. В рамках работы был проведен сбор дифракционных данных в Европейском центре синхротронных исследований (ESRF, Гренобль, Франция) [2]. Исследуемые в работе кристаллы давали дифракцию, в некоторых случаях достигающую 1 Å (см. рис. 1). Данные были проинтегрированы программой XDS и прошкалированы программой XSCALE [3], фазовая проблема была решена методом молекулярного замещения в программе PHASER [4]. Уточнение полученных моделей произведено с помощью программного пакета PHENIX [5], ручное уточнение проведено в программе COOT [6].

В результате получены модели белков атомарного разрешения. На рис. 2 продемонстрирована электронная плотность гема белка. Полученные результаты позволяют сделать важные выводы относительно структуры и функции исследованных белков.



Рис. 1. Дифракционная картина с разрешением 1,15 Å, собранная на синхротроне ESRF



Рис. 2. Карты электронной плотности, визуализированные в программе РуМОL

Работы выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (RFMEFI58716X0026).

Литература

- 1. Нельсон Д., Кокс М. Основы биохимии Ленинджера. В 3 томах. Т. 2. М.: БИНОМ, 2014. 640 с.
- 2. The ESRF The European Synchrotron Radiation Facility. URL: http://www.esrf.eu
- 3. XDS Programm Package. URL: http://xds.mpimf-heidelberg.mpg.de/
- 4. Phaser. URL: http://www.phaser.cimr.cam.ac.uk/
- 5. Python-based Hierarchical ENvironment for Integrated Xtallography (PHENIX). URL: <u>https://www.phenix-online.org/</u>
- 6. Crystallographic Object-Oriented Toolkit (COOT). URL: https://www2.mrclmb.cam.ac.uk/personal/pemsley/coot/

УДК 577.22

Подготовка CysLT2 рецептора к структурно-функциональным исследованиям

А.Е. Бурдакова, А.Ю. Гусач, А.П. Лугинина, П.А. Попов, Н.А. Сафронова, Е.А. Ляпина, А. В. Мишин, В. Г. Черезов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Цистеинил, лейкотриеновый рецептор второго типа, входит в семейство рецепторов, сопряженных с *G*-белком (GPCR) и является трансмембранным рецептором. GPCR отвечают за активацию внутриклеточной передачи сигнала, приводящую к клеточному ответу. Сбои в работе GPCR приводят к возникновению множества различных патологий, связанных с расстройством сигнальных систем, от аллергических реакций [1] и цветовой слепоты [2] до сердечно-сосудистых заболеваний и канцерогенеза [3]. Таким образом, рецепторы семейства GPCR являются важным объектом исследования не только с точки зрения молекулярной биологии, но и для медицины, фармакологии.

Ген человеческого CysLT2 рецептора находится на 13-й хромосоме [4], рядом с маркером, ассоциированным с астмой. Данный белок экспрессируется в клетках печени и лейкоцитах периферийного кровотока, в спинном мозге, в нескольких регионах головного

мозга, надпочечниках. На данный момент существуют статьи, которые описывают роль цистеинил лейкотриенового рецептора второго типа в развитии астмы [5], сердечнососудистых заболеваний [6], увеальной меланомы [7].

В данной работе исследуются мутантные формы CysLT2 рецептора с целью сравнительного анализа конструкций и выявления тех мутаций, которые повышают экспрессию белка в клетках *Sf9*, а также улучшают термостабильность белка.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект № 16-14-10273.

Литература

- 1. Bäck M. [et al.]. International Union of Basic and Clinical Pharmacology. Update on Leukotriene, Lipoxin and Oxoeicosanoid Receptors: IUPHAR Review 7 // Br. J. Pharmacol. 2014. P. 1–60.
- Thompson M.D., Burnham W.M., Cole D.E.C. The G protein-coupled receptors: pharmacogenetics and disease // Crit. Rev. Clin. Lab. Sci. 2005. V. 42, N 4. P. 311–392.
- 3. *Gschwind A.* [*et al.*]. TACE cleavage of proamphiregulin regulates GPCR-induced proliferation and motility of cancer cells // EMBO J. 2003. V. 22, N 10. P. 2411–2421.
- 4. *Heise C.E.* [*et al.*]. Characterization of the human cysteinyl leukotriene 2 receptor // J. Biol. Chem. 2000. V. 275, N 39. P. 30531–30536.
- 5. *Capra V.* [*et al.*]. Cysteinyl-leukotrienes and their receptors in asthma and other inflammatory diseases: critical update and emerging trends // Med. Res. Rev. 2007. V. 27, N 4. P. 469–527.
- 6. *Ni N.C.* [*et al.*]. A Selective Cysteinyl Leukotriene Receptor 2 Antagonist Blocks Myocardial Ischemia / Reperfusion Injury and Vascular Permeability in Mice. 2011. V. 1. P. 768–778.
- 7. Thomas P Sakmar, Yu Chen [et al.]. Recurrent activating mutations of G-protein-coupled receptor CYSLTR2 in uveal melanoma. // Nat Genet. 2016. 48(6):675–80.

УДК 577.322

Изучение конформационной динамики мембранных белков методом флуоресцентной микроскопии одиночных молекул

И.В. Маслов¹, Н. С. Ильинский¹, Н.А. Сафронова¹, А.О. Богородский¹, М.Б. Шевцов¹, Н.Л. Маляр¹, П.К. Кузьмичев¹, А.В. Мишин¹, В.Г. Черезов^{1,2}, В.И. Борщевский¹

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Университет Южной Калифорнии (USC, г. Лос-Анджелес, США)

Мембранные белки играют важную роль в различных физиологических процессах и являются перспективными фармакологическими мишенями против широкого класса заболеваний. Известно, что мембранные белки могут иметь множество устойчивых конформаций, и их активность связывают с запуском различных сигнальных путей, недостаточная изученность которых существенно затрудняет разработку лекарств: из-за нежелательных сигнальных путей у препарата появляются побочные эффекты.

С помощью флуоресцентной микроскопии одиночных молекул можно следить за изменением конформации белка в реальном времени. Реализация такого эксперимента требует выполнения ряда условий: мечение белка должно быть высокоспецифичным, свободные красители должны быть исключены из препарата, белок должен быть помещен в моделирующие мембрану условия, белки должны быть иммобилизованы на поверхности покровного стекла микроскопа с молекулярно-низкой плотностью посадки, притом должны быть подавлены автофлуоресценция подложки и рабочих растворов.

Для реализации описанного выше эксперимента была проведена оптимизация протокола очистки и функционализации покровного стекла. Были проведены пробные опыты по иммобилизации немембранного флуоресцентного белка и мембранного с флуоресцентной меткой.

Работа выполнена при поддержке ERA.Net RUS PLUS и Министерства образования и науки Российской Федерации (проект 323, RFMEFI58715X0011); кроме того, Борщевский В. выражает благодарность за персональную грантовую поддержку (проект № 6.9909.2017/ВУ).

УДК 577.22

Экспрессия и очистка рецептора GPR17

Н. Сафронова¹, А. Лугинина¹, В. Вистунов¹, А. Гусач¹, А. Бурдакова¹, А. Мишин¹, В. Черезов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ² The University of Southern California, Los Angeles, USA

Рецепторы, сопряжённые с G-белком, (англ. G-protein-coupled receptors, GPCRs) – семейство трансмембранных рецепторов, включающее в себя около 800 различных белков. Семейство GPCR составляет около 4% от всего генома, кодирующего белки, при этом сами рецепторы являются мишенями для 40% выпускаемых сегодня лекарств.

Предметом данной работы является GPR17. Ранее считалось, что данный рецептор взаимодействует с двумя классами лигандов – цистеинил-лейкотриенами и урацилнуклеотидами, что соответствует его положению на филогенетическом дереве GPCR. Однако не всем исследовательским группам удалось получить доказательства связывания GPR17 с каким бы то ни было лигандом – синтетическим или эндогенным. На сегодняшний день опубликовано около сотни экспериментальных работ, имеющих своим предметом GPR17, но многие результаты до сих пор вызывают сомнение.

GPR17 преимущественно экспрессируется в клетках головного мозга [1–4]. Также он обнаруживается в спинном мозге [5] и в меньших количествах в сердце [1, 2, 6], печени [1, 2], почках [2], легких [2], а также в тучных клетках [7], дендритных клетках костного мозга [8] и в некоторых клетках крови – лейкоцитах [9] и, в частности, моноцитах [10].

Роль GPR17 в организме до сих пор до конца не ясна. Большинство экспериментальных данных подтверждают то, что экспрессия данного рецептора существенно меняется при различного рода повреждениях (ишемия, травмы, болезнь Альцгеймера). Число клеток с GPR17 в окрестностях поврежденного участка увеличивается как за счет клеток поврежденной ткани [2], так и за счет иммунных клеток [7]. Также более-менее окончательно установлено, что GPR17 играет роль своеобразного таймера в созревании олигодендроцитов и, как следствие, в процессе миелинизации аксонов нейронов.

На сегодняшний день установлено, что GPR17 прямо или косвенно связан с такими заболеваниями, как ишемическая болезнь, болезнь Альцгеймера, рассеянный склероз, инфаркт миокарда.

Есть многочисленные экспериментальные данные о том, что ингибирование GPR17 позволяет уменьшить последствия повреждений при травмах/ишемии головного и спинного мозга, что делает GPR17 привлекательной потенциальной мишенью [2]. В связи с этим проблема поиска эндогенных и синтетических лигандов для GPR17 до сих пор очень актуальна. Знание структуры рецептора, несомненно, поможет в ее решении.

В данной работе мы провели оптимизацию условий экспрессии и очистки GPR17 с целью получения чистого, стабильного и мономерного белка. Также были произведены многочисленные проверки на предмет связывания GPR17 с различными лигандами.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект № 16-14-10273.

- Bläsius R. [et al.]. A novel orphan G protein-coupled receptor primarily expressed in the brain is localized on human chromosomal band 2q21 //Journal of neurochemistry. 1998. V. 70. N 4. P. 1357–1365.
- 2. *Ciana P.* [*et al.*]. The orphan receptor GPR17 identified as a new dual uracil nucleotides/cysteinyl-leukotrienes receptor //The EMBO journal. 2006. V. 25. N 19. P. 4615–4627.
- Zhang L. H., Zho J. B., Wang Y. F. Research advance in cysteinyl leukotriene receptors with brain injury //Zhejiang da xue xue bao. Yi xue ban= Journal of Zhejiang University. Medical sciences. 2008. V. 37. N 3. P. 315–320.
- 4. *Maisel M.* [*et al.*] Transcription profiling of adult and fetal human neuroprogenitors identifies divergent paths to maintain the neuroprogenitor cell state //Stem Cells. 2007. V. 25. N 5. P. 1231–1240.

- 5. *Ceruti S.* [*et al.*] The P2Y-like receptor GPR17 as a sensor of damage and a new potential target in spinal cord injury //Brain. 2009. V. 132. N 8. P. 2206–2218.
- Banfi C. [et al.] P2 receptors in human heart: upregulation of P2X 6 in patients undergoing heart transplantation, interaction with TNFα and potential role in myocardial cell death //Journal of molecular and cellular cardiology. 2005. V. 39. N 6. P. 929–939.
- 7. *Agier J.* [*et al.*] Leukotriene receptor expression in mast cells is affected by their agonists //Cellular Immunology. 2017.
- 8. *Itagaki K.* [*et al.*] Eicosanoid-induced store-operated calcium entry in dendritic cells //Journal of Surgical Research. 2011. V. 169. N 2. P. 301–310.
- 9. *Aalto Y.* [*et al.*] Distinct gene expression profiling in chronic lymphocytic leukemia with 11q23 deletion //Leukemia (08876924). 2001. V. 15. N 11.
- Maekawa A. [et al.] GPR17 is a negative regulator of the cysteinyl leukotriene 1 receptor response to leukotriene D4 //Proceedings of the National Academy of Sciences. 2009. V. 106. N 28. P. 11685–11690.

УДК 577.115.7

Функционализированные липосомы – перспективные наноагенты для создания лиганд-чувствительных нанокомплексов биомедицинского назначения

А. В. Лунин¹, М. П. Никитин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

Лиганд-чувствительные наноконструкции (ЛЧН) на основе наночастиц различной природы, в том числе магнитные, золотые, полимерные или белковые, представляют значительный интерес для использования в биосенсорике, направленной доставке лекарственных средств, биоимиджинге и для других биомедицинских применений [1]. Нами была изучена возможность использования липосом в качестве агентов для подобных систем.

Для этой цели нами были исследованы липосомы различных размеров в диапазоне от 100 нм до 1 мкм, которые были получены с использованием холестерина, фостфатидилхолина и фосфатидилэтаноламина.

Для придания липосомам дополнительных функций, в том числе для улучшения их визуализации, повышения специфичности связывания с молекулярными мишенями и т. д. нами были исследованы функцианализирующие агенты на основе малых молекул, в том числе биотина N-гидроксисукцинимидного эфира, флуоресцеина изотиоцианата, фолиевой кислоты и натриевой соли сукцината хлорамфеникола, а также отработаны условия функционализации, выделения и идентификации функциональных липосом.

В результате экспериментов были реализованы следующие функции липосомальных наноконструкций – узнавание низкомолекулярного аналита, проверка специфичности его связывания и вытеснения из сформированного иммунокомплекса, а также продемонстрирована возможность применения функционализорованных липосом как перспективных лиганд-чувствительных наноагентов.

Литература

1. Edina C. Wang and Andrew Z. Wang Targeted Nanoparticles and Their Applications in Biology // Integr. Biol. 2014. V. 6. N 1. P. 9–26.

Структура полноразмерного комплекса NpSRII/NpHtrII

Ю.Л. Рижиков¹, М.Ю. Николаев^{1,2}, Д.В. Забельский¹, Т.Н. Муругова^{1,3}, А.И. Куклин^{1,3}, В.И. Горделий^{1,4,5}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne, Switzerland ³Объединённый институт ядерных исследований ⁴Institut de Biologie Structurale J.-P. Ebel, Grenoble, France ⁵Institute of Complex Systems: Structural Biochemistry (ICS-6), Research Centre Jülich, Germany

Сенсорный родопсин II (фобородопсин) археи *Natronomonas pharaonis* является фотоактивным семиспиральным мембранным белком, который отвечает за отрицательный фототаксис. Он является сенсором, относящимся к двухкомпонентной сигнальной системе (TCS), самой распространенной в природе. В настоящее время не существует структуры хотя бы одного сенсора TCS и соответсвенно нет полного понимания молекулярного механизма передачи сигнала от сесорного домена клетки в ее цитопламатическую часть и далле на регулятор ответа. Сенсорный родопсин II (NpSRII) образует комплекс с трансдюсером II (NpHtrII), который имеет две трансмембранные спирали и цитоплазматическую часть. Воздействие света на NpSRII вызывает вращение второй трансмембранной спирали NpHtrII, что приводит к структурным перестроениям цитоплазматической части трансдюсера II, запускающим каскад реакций внутри клеточной цитоплазмы [1]. В соответствии с известной структурой NpSRII с укороченным трансдюсером NpHtrII₁₁₄ (аминокислоты 1–114) комплекс функционирует в димерной форме [2].

В настоящей работе мы исследовали формирование кластеров полноразмерного комплекса NpSRII/NpHtrII. Белок был экспрессирован в бактериях *Escherichia coli* (штамм Rosetta2(DE3)) и очищен с помощью аффинной хроматографии. Для солюбилизированного в детергенте DDM комплекса NpSRII/NpHtrII была проведена реконституция в нанодиски на основе липида DMPC и белка MSP1E3D1 [3].

Для получения структурной информации о встроенном в нанодиски комплексе NpSRII/NpHtrII нами были проведены измерения с помощью методов малоуглового рентгеновского (МУРР) и нейтроного (МУРН) рассеяния [4]. Были приготовлены растворы встроенного в нанодиски комплекса в серии концентраций сахарозы и серии соотношений обычной и дейтрированной воды. МУРР измерения проводились на установке ВМ29 (синхротрон ESRF, Гренобль, Франция) [5] и на установке нейтронного рассеяния ЮМО (ИБР-2, Дубна, Россия) [6–7].

Для кривых малоуглового нейтронного и рентгеновского рассеяния были получены инварианты рассеяния (радиусы гирации, интенсивности в нулевой угол, породовские объёмы) и функции Паттерсона. Были посчитаны средние плотности длины рассеяния, парциальные объёмы частицы и суммарные длины рассеяния. С помощью программы DAMMIF программного пакета ATSAS [8] были получены *ab-initio* модели комплекса NpSRII/NpHtrII, встроенного в нанодиски.

Показано, что комплекс сенсорного родопсина II с трансдюсером II образует тример димеров, как в природе, при его реконституции в такую мембранно-имитирующую среду как нанодиски [9]. Это работа открывает новые возможности для исследования механизма передачи сигнала в TCS. Возможная роль формирования тримера димеров комплекса в передаче сигнала при отрицательном фототаксисе обсуждается в [10].

Мы благодарим программу «5ТОП100» за поддержку этой работы.

- 1. *Ishchenko A*. Molecular mechanisms of signal transduction in two component signaling systems // PhD thesis. 2013. (URL: https://publications.rwth-aachen.de/record/230015/files/4593.pdf)
- 2. Gordeliy V. I., Labahn J., Moukhametzianov R., Efremov R., Granzin J., Schlesinger R., Büldt G.,

Savopol T., Scheidig A. J., Klare J. P., Engelhard M. Molecular basis of transmembrane signalling by sensory rhodopsin II-transducer complex // Nature. 2002. V. 419. P. 484–487.

- 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. V. 11. P. 211–231.
- 4. Свергун Д. И., Фейгин Л. А., Рентгеновское и малоугловое рассеяние. М.: Наука, 1986. 279 с.
- Pernot P., Round A., Barrett R., De A., Antolinos M., Gobbo A., Gordon E., Huet J., Me Kieffer J., Lentini M., Mattenet M., Morawe C., Mueller-Dieckmann C., Ohlsson S., Schmid W., Surr J., Theveneau P., Zerrad L. and Mcsweeney S. // Upgraded ESRF BM29 beamline for SAXS on macromolecules in solution. J. Synchrotron Rad. 2013. V. 20. P. 660–664.
- 6. *Kuklin A.I., Islamov A. Kh., Gordeliy V.I.* Scientific Reviews: Two-Detector System for Small-Angle Neutron Scattering Instrument // Neutron News. 2005. P. 16–18.
- 7. Kuklin A.I. [et al.]. Optimization two-detector system small-angle neutron spectrometer YuMO for nanoobject investigation // Journal of Surface Investigations. 2006. V. 6. P. 74–83.
- D. Franke, M. V. Petoukhov, P. V. Konarev, A. Panjkovich, A. Tuukkanen, H. D. T. Mertens, A. G. Kikhney, N. R. Hajizadeh, J. M. Franklin, C. M. Jeffriesa and D. I. Svergun. ATSAS 2.8: a comprehensive data analysis suite for small-angle scattering from macromolecular solutions // J. Appl. Cryst. 2017. V. 50. P. 1212–1225.
- Ryzhykau Y., Nikolaev M., Zabelskii D., Kuklin A., Gordeliy V. Trimers of dimers of SRII/HtrII full complex. Small angle scattering structural investigation // The FEBS Journal. 2017. V. 284. Suppl. 1. P. 154.
- 10. Orekhov P. Signaling and Adaptation in Prokaryotic Receptors as Studied by Means of Molecular Dynamics Simulations // PhD thesis. 2016. (URL: https://repositorium.ub.uniosnabrueck.de/handle/urn:nbn:de:gbv:700-2016081014821)

УДК 577.322.9

Разработка дескриптора для описания интерфейса взаимодействия GPCR-лиганд

Д.Д. Романовская, П.А. Попов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Сопряженные с G-белком рецепторы играют значительную роль во многих биологических процессах. Они регулируют множество метаболических путей, осуществляя передачу сигнала в клетку. То, как работает рецептор часто зависит от связанного с ним лиганда, который может быть как агонистом, увеличивающим отклик рецептора, так и антагонистом, уменьшающим его. Многие GPCRы являются мишенями для лечения заболеваний, а их агонисты или антагонисты – потенциальными различных лекарственными средствами. Во многих случаях задача поиска новых лекарственных средств сводится к решению задачи поиска лиганда к GPCRy, который будет обладать аффинностью, превосходящую аффинность эндогенного лиганда. Экспериментальные методы поиска требуют больших временных и денежных затрат, поэтому крайне актуальна разработка методов поиска лигандов in silico. Одним из вопросов, на которые нужно ответить в ходе решения этой задачи – это численное 1D описание комплекса рецепторлиганд.

Описание осуществляется с помощью фингерпринтов (fingerprints) – численных векторов, в которых закодирована информация о взаимодействиях атомов лиганда с атомами рецептора, исходя из физических, химических и пространственных свойствах их взаимодействия. Предложенный нами подход заключается в том, чтобы скомбинировать различные характеристики взаимодействия белок-лиганд и получить единый вектор – дескриптор, который полностью описывает интерфейс взаимодействия. В составе нашего дескриптора реализовано четыре подхода к описанию молекулярного комплекса. Первый представляет собой простейший фингерпринт взаимодействия (SIF) [1], который хранит в восьми битах информацию об основных параметрах взаимодействия (наличие водородных связей, полярность, принадлежность атома рецептора к основной или боковой цепи) для

каждой пары атомов лиганда и рецептора. Надстройкой на него является SPLIF [2], который описывает взаимодействие каждого атома сайта связывания рецептора и лиганда со всеми атомами, находящимися от него в определенном радиусе. Для каждой такой группы атомов в определенном радиусе генерируется своя строка, в которой значение 1 соответствует идентификатору, определенному по алгоритму Моргана [3]. Также мы используем альтернативный комплексный фингерпринт RDF, который основан на радиальных функциях распределения и показывает, как плотность распределения атомов меняется в зависимости от расстояния от исследуемого атома [4]. Заключительная составляющая полного дескриптора это 3D-фармакофор (набор пространственных и физических признаков низкомолекулярного соединения) пространственной структуры лиганда. В свободном доступе реализовано много 3D-фармакофоров, был использован геометрический пространственный фармакофор из пакета jCompoundMapper [5].

Разработанный нами дескриптор представляет собой числовой вектор, длина которого зависит от размера сайта связывания рецептора. Так как ортостерический пакет, в котором связывается лиганд, является универсальным для большинства GPCR-ов, то разработанный дескриптор можно будет применять для большого числа рецепторов. Реализация алгоритмов, вычисляющих фингерпринты для сайта связывания на примере конкретного рецептора, выполнена на языке С++. Полученный дескриптор позволит эффективно применять современные методы анализа данных и машинного обучения для поиска новых агонистов или антагонистов к рецептору.

Литература

- Deng Z., Chuaqui C. and Singh J. Structural Interaction Fingerprint (SIFt): A Novel Method for Analyzing Three-Dimensional Protein–Ligand Binding Interactions // J. Med. Chem. 2004. V. 47. N 2. P. 337–344.
- 2. *Da C. and Kireev D.* Structural protein-ligand interaction fingerprints (SPLIF) for structure-based virtual screening: Method and benchmark study // J. Chem. Inf. Model. 2014. V. 54. N 9. P. 2555–2561.
- 3. *Morgan H. L.* The Generation of a Unique Machine Description for Chemical Structures-A Technique Developed at Chemical Abstracts Service // J. Chem. Doc. 1965. V. 5. N 2. P. 107–113.
- 4. *Kadukova M. and Grudinin S.* Convex-PL: a novel knowledge-based potential for protein-ligand interactions deduced from structural databases using convex optimization // J. Comput. Aided. Mol. Des. 2017. P. 1.
- 5. *Hinselmann G., Rosenbaum L., Jahn A., Fechner N. and Zell A.* jCompoundMapper: An open source Java library and command-line tool for chemical fingerprints // J. Cheminform. 2011. V. 3. N 1. P. 3.

УДК 579.843

Анализ микрофлоры язвенных повреждений кожных покровов дальневосточной горбуши.

С.В. Баженов^{1,2}, Т.Ю. Углова³, А.Н. Ельников³, Н.В. Кловач³, И.В. Манухов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

² Государственный научно-исследовательский институт генетики и селекции

промышленных микроорганизмов

³ Всероссийский научно-исследовательский институт рыбного хозяйства и океанографии

Бактерии вида Aliivibrio salmonicida способны вызывать холодоводный виброзис [1], сопровождающийся поражением внутренних органов и образованием язв на кожных покровах. В конце XX в. бактерии вида A. salmonicida нанесли значительный ущерб рыбному промыслу в Норвегии, где на рыбных фермах с 1998 года стали специально применять вакцинацию для борьбы с этим патогенным микроорганизмом. До настоящего времени не было проведено никаких исследований распространенности этого вида патогенных бактерий в акваториях Берингова и Охотского морей. Настоящая работа была посвящена исследованию ареала патогенных для лососевых рыб бактерий вида A. salmonicida,. С этой целью была проведена экспедиция в августе–сентябре 2016 года на

о. Итуруп, где были собраны образцы микрофлоры кишечника и язвенных повреждений кожных покровов дальневосточной горбуши, выловленной в преднерестовый период.

При первичном осмотре выловленной рыбы на рыбоперерабатывающих предприятиях ЗАО «Гидрострой», находящихся на о.Итуруп (РПК «Рейдово», ЛРЗ «Курильский»), и на рыбопромысловых участках (бухта Сопочная и мыс Разбойник о. Итуруп) было обнаружено, что в уловах горбуши часто встречается рыба с повреждёнными кожными покровами (в некоторых партиях до 30% особей от общего улова). Повреждения имели характер незаживающих, с признаками загнивания. Большинство язв образовывалось на местах механических повреждений или укусов миног. Сбор образцов осуществлялся как с кожных покровов и кишечника условно здоровой рыбы, так и с повреждённых участков кожных покровов и кишечника пораженных рыб. Основной целью сбора был поиск патогенных для лосося бактерий *А. salmonicida*, анализ нормальной люминесцирующей микрофлоры (в том числе распространения родственных *А. salmonicida* светящихся бактерий *Aliivibrio logei*), а также общий анализ культивируемых форм бактерий населяющих незаживающие изъязвления кожных покровов горбуши.

В результате проведённых работ собрано 123 образца микрофлоры. Из них 44 соскоба из язв, 3 соскоба с нормальных кожных покровов и 76 образцов содержимого кишечника как пораженных язвами, так и здоровых рыб. Из собранных образцов было изолировано 470 клонов, подлежащих дальнейшей идентификации родовой и по возможности видовой принадлежности.

Было обнаружено, что 37 образцов микрофлоры кишечника рыб содержали люминесцирующую микрофлору. Идентификация люминесцирующей микрофлоры посредством филогенетического анализа последовательностей 16S рРНК генов показала наличие преимущественно бактерий рода *Photobacterium*, что подтверждает гипотезу о широком распространении этого вида в кишечнике морских рыб в летний период [2].

Для всех изолированных штаммов был проведен масс-спектрометрический анализ. Полученные спектры были сравнены с референсными спектрами штамма A. salmonicida LF1238. Масс-спектрометрический метод идентификации бактериальных штаммов обладает достаточной точностью, чтобы определять их родовую и зачастую видовую принадлежность, но различия между спектрами близкородственных видов нередко бывают незначительны, и необходимо применять дополнительные инструменты лля более точной идентификации (фенотипические признаки, биохимические, секвенирование ДНК). В качестве примера таких близкородственных видов можно привести Aliivibrio logei и A. salmonicida. Среди изолированных штаммов бактерии вида A. salmonicida обнаружены не были, что свидетельствует в пользу гипотезы о локальном распространении этого патогенного микроорганизма в районе северной Атлантики.

Анализ образцов микрофлоры несветящихся микроорганизмов показал, что в образцах, собранных с изъязвлённых кожных покровов рыб, взятых на промысловых участках (непосредственно из сетей), имеются микроорганизмы, способные к гемолизису (рис. 1). Анализ последовательностей генов 16S рРНК штаммов, способных вызывать гемолизис, показал, что большая часть из них принадлежит виду *Marinospirillum minutulum*, но также встречаются отдельные представители родов *Flavobacterium* и *Pseudoalteromonas*. Штаммы № 43, № 209, № 217 и № 239, принадлежащие виду *M. minutulum*, проявляют наибольшую гемолитическую активность.

В язвах рыб, отобранных на заводе «Рейдово», было обнаружено большое видовое разнообразие микроорганизмов, по-видимому, связанное с тем, что рыба скученно находится некоторое время в прорези сети и в приёмном баке плавбазы до отбора образцов. В то время как бактериальные штаммы, способные к гемолизису (признак патогенности), были получены из образцов микрофлоры из язв рыбы, пойманной в море непосредственно перед забором пробы. Данные образцы получены близ оз. Сопочное и у пос. Курильск (РПК «Рейдово»). В кишечнике пораженных язвами рыб не обнаружено бактерий, способных к гемолизису, т. е. поражение кожных покровов, по-видимому, не связано в данном случае с патогенезом кишечника.

В дальнейшем полученные данные будут использованы для разработки мер по предотвращению эпизоотий популяций дальневосточного лосося, полученных методами искусственного оплодотворения икры и подращивания молоди.

Заключение

Проведены работы по исследованию возбудителей заболеваний тихоокеанских лососей в высокопродуктивных популяциях с большой долей особей заводского происхождения. Среди проанализированных штаммов представителей вида A. salmonicida обнаружено не было. В образцах микрофлоры язвенных повреждений были обнаружены штаммы бактерий вида M. minutulum, обладающие значительной гемолитической активностью.



Рис. 1. Фотография чашки Петри с бактериальными штаммами, полученными из образцов тканей язв на кожных покровах горбуши. Прозрачное гало вокруг посевов бактерий на кровяном агаре свидетельствует о гемолитической активности этих клонов

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 16-04-01160 А.

- 1. Holm K.O., Strøm E., Stensvag K., Raa J., Jørgensen T. Characteristics of a Vibrio sp. associated with the «Hitra disease» of Atlantic salmon in Norwegian fish farms // Fish Pathology. 1985. 20(2-3): 125-9.
- Коноплёва М.Н., Хрульнова С.А., Осетрова М.С., Дёгтев Д.И., Манухов И.В., Завильгельский Г.Б., Анализ люминесцирующей микрофлоры кишечника рыб студёных морей: Белого, Берингова и Охотского // труды ВНИРО. 2015. Т. 157. С. 24–31.

Видовой состав психрофильной люминесцирующей микрофлоры кишечника рыб Белого, Берингова и Охотского морей

М.В. Павельченко, С.В. Баженов, М.Н. Коноплева, И.В. Манухов

Московский физико-технические институт (государственный институт)

Люминесценция присуща большому разнообразию живых организмов. Однако из них среди морских люминесцирующих бактерий большинство относится только к родам Vibrio, Aliivibrio и Photobacterium (семейство Vibrionacenae). При этом разные виды приспособлены к обитанию при различных температурах. Психрофильные морские люминесцирующие бактерии, такие как A. logei и P. Phosphoreum, способны расти при температуре 2–3 °C, имея оптимум роста и размножения в районе 10–15 °C, в то время как мезофильные морские бактерии типа A. fischeri не приспособлены к росту при температуре ниже 10 °C, а их оптимум находится выше 20–25 °C. Для водоемов свойственен неоднородный профиль температуры по глубине, который обусловлен наличием несмешивающихся слоев воды. Граница между этими слоями называется зоной термоклина. Температура верхнего слоя воды в зависимости от сезона может быть выше или ниже, чем температура нижнего, которая постепенно убывает с глубиной.

Целью данной работы является проверка гипотезы о температурной зависимости состава люминесцентной микрофлоры кишечника морских рыб (взаимозамещение бактерий видов *A. logei* и *P. phosphoreum*). Для этого был проведен анализ зависимости видового разнообразия люминесцирующей микрофлоры кишечника рыб от сезона в акваториях Берингова и Охотского морей и от температурных режимов установившихся на различных глубинах Белого моря.

Анализ люминесцирующей микрофлоры кишечника рыб Берингово и Охотского морей показал, что наблюдавшееся ранее [1] видовое замещение связано не с полным вытеснением рода *Aliivibrio* из данного ареала, а связано с сезонными колебаниями (результаты всех экспедиций отражены на рис. 1.)

Масс-спектрометрический анализ показал, что все отобранные в результате экспедиции на Белое море люминесцирующие штаммы делятся на две группы с идентичными спектрами. Можно предположить, что внутри каждой группы клоны относятся к одному виду бактерий. Причем между этими группами штаммы распределены неравномерно, два образца соответствуют одной группе, остальные – другой. Ни один из полученных спектров не совпадал с типовыми спектрами бактерий *A. logei*, т.е. изолированы штаммы двух видов ни один из которых, по-видимому, не является *A. logei*. Следует отметить, что ранее в акватории Белого моря были изолированы бактерии только двух видов, способных к биолюминесценции, – это *A. logei* и *P. phosphoreum* [2, 3]. Корреляция видового состава с глубиной обитания рыб не была обнаружена.

Для определения видовой принадлежности найденных бактерий были выбраны три изолированных штамма, выделена ДНК и получены ПЦР фрагменты генов 16S рРНК для секвенирования. С точностью до вида изолированные штаммы предполагается определить с помощью филогенетического анализа последовательности 16S рРНК и, при необходимости, «house keeping» генов.



Рис. 1. Сезонная зависимость соотношения численности представителей видов Р. phosphoreum и А. logei, изолированных из кишечника рыб в акваториях Охотского и Берингова морей

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 16-04-01160 А.

Литература

- Коноплёва М.Н., Хрульнова С.А., Осетрова М.С, Дёгтев Д.И, Манухов И.В., Завильгельский Г.Б. Анализ люминесцирующей микрофлоры кишечника рыб студеных морей: Белого, Берингова и Охотского. 2015 // Труды ВНИРО «Материалы второй научной школы ВНИРО для молодых ученых и специалистов». Часть 2. Т.157 С. 24–31.
- 2. *Хрульнова С.А., Манухов И.В, Завильгельский Г.Б.*. «Quorum sensing» регуляция экспрессии *lux*генов и структура *lux*-оперона у морских бактерий *Aliivibrio logei* // Генетика. 2011. Т. 47, № 12. С. 1596–1603.
- 3. Куц В.В., Исмаилов А.Д. Физиологические и эмиссионые характеристики Photobacterium phosphoreum из Белого моря // Микробиология. 2009. Т. 78, № 5. С. 612–617.

УДК 577.24

Воздействие антиоксидантов на молекулярные механизмы старения: замедление укорачивания теломер и повреждения митохондрий в условиях окислительного стресса

А.И. Добрынин, А.Н. Дубенко, Н.С. Ильинский

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Существует внушительное множество научных теорий старения человека, среди которых выделяется теория свободных радикалов, предложенная Д. Харманом [1]. Неоспоримым фактом является то, что повреждения клетки из-за окислительного стресса действительно играют важную роль в болезнях прогерии [2]; но в целом, картина остаётся запутанной, различные взгляды на старение организма переплетаются. Так, теломеры сильнее подвержены укорочению под воздействием активных форм кислорода (АФК) [3]. Особое внимание в проекте уделяется двойной роли АФК, ведь они активно участвуют в регулировании многих сигнальных путей путём пост-трансляционных модификаций белков [4]. Порой увеличение концентрации АФК происходит одновременно с увеличением длительности жизни [5], а большое число клинических испытаний не смогло показать терапевтического эффекта антиоксидантов [6].

Перед нами стоит задача изучения механизмов взаимодействия известных агентов, определяющих процессы старения и поиск способов повлиять на них. Конкретной целью проекта является исследование эффективности работы группы антиоксидантов на культуре

человеческих фибробластов (рис. 1, 2), а также определение характера их воздействия на теломеры. В докладе мы представляем широко использующиеся методы анализа: определение длины теломерного участка ДНК при помощи флуоресцентной гибридизации in situ (Flow-FISH) [7], сравнительное измерение концентрации АФК в клетках при индуцированном окислительном стрессе и без него на основе флуоресцентного сигнала разных молекул – индикаторов АФК [8], наблюдение изменения количества делений клеток при наличии антиоксидантов.

В данный момент отработана технология культивации клеток, в ближайшее время будут оптимизированы метод Flow-FISH и метод измерения уровня H_2O_2 с использованием Amplex Red. В дальнейшем эти методы будут применены в исследовании роли антиоксидантов в регулировании уровня $A\Phi K$ и длины теломер.



Рис. 1. Модельный организм – человеческие фибробласты MRC-5



Рис. 2. Старые клетки MRC-5

- 1. Harman D. The aging process // PNAS USA. 1981. 78(11). 7124-8.
- 2. Beckman K.B., Ames B.N. The free radical theory of aging matures // Physiol. Rev. 1998. 78. 547-581.
- 3. Von Zglinicki T. Oxidative stress shortens telomeres // Trends Biochem. Sci. 2002. 27. 7. 339-344.
- 4. Tonks N.K. Redox redux: revisiting PTPs and the control of cell signaling. // Cell. 2005. 121(5). 667-70.
- 5. *Pan Y.1, Schroeder E.A., Ocampo A., Barrientos A., Shadel G.S.* Regulation of yeast chronological life span by TORC1 via adaptive mitochondrial ROS signaling // Cell Metab. 2011. 13(6). 668–78.
- Bjelakovic G., Nikolova D., Gluud L.L., Simonetti R.G., Gluud C. Mortality in randomized trials of antioxidant supplements for primary and secondary prevention: systematic review and meta-analysis // JAMA. 2007. 297(8). 842–57.
- 7. Baerlocher G.M., Vulto I., de Jong G., Lansdorp P.M. Flow cytometry and FISH to measure the average length of telomeres (flow FISH) // Nat. Protoc. 2006. 1. 2365–2376.

8. Kalyanaraman B., Darley-Usmar V., Davies K.J.A., [et al.]. Measuring reactive oxygen and nitrogen species with fluorescent probes: challenges and limitations // Free Radical Biol. Med. 2012. 52(1). 1–6.

УДК 577.352.336

Исследования светоиндуцированных структурных изменений в мутанте бактериородопсина D96N методом МУРР

А.А.Гапченко¹, А.В.Власов¹, Ю.Л.Рижиков¹, В.И.Горделий^{1,2}, А.И.Куклин^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет) ² Объединённый институт ядерных исследований

Представлены результаты измерения изменений радиуса гирации пурпурных мембран (ПМ), содержащих мутант бактериородопсина D96N, в течение светоиндуцированного М-состояния в сравнении с ground-состоянием. Малоугловые измерения были выполнены на рентгеновской установке Rigaku, МФТИ, Долгопрудный [1] и на Европейском источнике синхротронного излучения (ESRF, BM29), Гренобль, Франция [2].

Более ранние исследования показали изменения третичной структуры белка бактериородопсина в течение М-состояния [3] и, возможно, соответствующие изменения толщины ПМ [4]. Однако они не предоставляли полной информации о том, являлись ли эти изменения толщины и, соответственно, радиуса гирации эффектом светового излучения или же они были вызваны веществами, «замораживающими» М-состояние. Для проверки этой гипотезы был использован мутант бактериородопсина D96N, особенность которого – существенно удлинённое по времени М-состояние в сравнении с wild-type бактериородопсином. Это позволило отказаться от использования химических методов «заморозки» М-состояния. Также было исследовано, как состояние агрегированности ПМ влияет на светоиндуцированные изменения.

В этой работе пурпурные мембраны рассматривались в агрегированном и неагрегированном состоянии и при различных значениях кислотности среды. Ранее было обнаружено, что наиболее сильные изменения структуры ПМ могут быть замечены при щелочных значениях pH выше 8,5 [5]. В большинстве наших измерений pH поддерживался равным $9,5 \pm 0,1$.

Для неагрегированных ПМ изменений радиуса гирации обнаружено не было. Этот факт подтверждает гипотезу, что ранее обнаруженные изменения толщины были вызваны связывающими М-состояние реактивами.

Для агрегированных ПМ были замечены светоиндуцированные изменения в начальной части кривой рассеяния (рис. 1), которые соответствуют изменениям среднего радиуса гирации в 1,5–2,0 Å.

Вышесказанное косвенно подтверждает предположение о светоиндуцированных структурных изменениях крупных агрегатов пурпурных мембран, тем не менее, механизмы этого эффекта обсуждаются.



Рис.1. Картина рассеяния для образца с агрегированными ПМ с белком бактериородопсином D96N в течение М-состояния (треугольные точки) и в течение ground-состояния (квадратные точки)

Литература

- Murugova T.N., Vlasov A.V., Ivankov O.I., Rogachev A.V., Ryzhykau Y.L., Soloviov D.V., Zhigunov A., Zinovev E.V., Kovalev Y.S., Round A., Gordeliy V.I., Kuklin A.I. Low resolution structural studies of apoferritin via SANS and SAXS: The effect of concentration // J. Optoelectron. Adv. Mater. 2015. 17. 1397–1402.
- Pernot P., Round A., Barrett R., De Maria Antolinos A., Gobbo A., Gordon E., Huet J., Kieffer J., Lentini M., Mattenet M., Morawe C., Mueller-Dieckmann C., Ohlsson S., Schmid W., Surr J., Theveneau P., Zerrad L. and McSweeney S. Upgraded ESRF BM29 beamline for SAXS on macromolecules in solution // J. Synchrotron Rad. 2013. 20. 660–664.
- 3. Müller D.J., Heymann J.B., Oesterhelt F., Möller C., Gaub H., Büldt G., Engel A. // Biochimica et Biophysica Acta. 2000. V. 1460. P. 27–38.
- Gapchenko A., Vlasov A., Ryzhykau Yu., Gordeliy V., Kuklin A. Analysis of M-state of Bacteriorhodopsin D96N // III international conference on SANS, Dubna. Book of abstract 2016. P. 101. ISBN 978-5-9530-0443-5.
- Miercke L.J.W., Betlach M.C., Mitra A.K., Shand R.F., Fong S.K. and Stroud R.M. Wild-Type and Mutant Bacteriorhodopsins D85N, D96N, and R82Q: Purification to Homogeneity, pH Dependence of Pumping, and Electron Diffraction // Biochemistry. 1991. V. 30, N 12. 3088–3098.

УДК 577.322.24

Исследование термодинамических свойств VHH-антитела против рецептора ErbB3

А.Н. Юденко¹, Н.А. Беседина¹, А.Б. Улитин², В.М. Екимова², С.Р. Евдокимов², Ю.В. Путинцева², П.А. Яковлев², М.И. Ломовская², И.Е. Елисеев¹

¹Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет Российской академии наук

² ЗАО «Биокад», Санкт-Петербург

Белки семейства рецепторных тирозин-киназ ErbB (Рецепторы эпидермального фактора роста) крайне часто аномально экспрессируются в опухолевых клетках. На сегодняшний день в терапии онкологических заболеваний успешно используются моноклональные антитела к рецепторам ErbB1 и ErbB2 [1]. Долгое время считалось, что ErbB3, также известный как HER3, не проявляет тирозин-киназную активность и, следовательно, не может учавствовать в передаче внутриклеточных сигналов. Однако в последнее десятилетие появились экспериментальные работы, показывающие эффективность комбинирования анти-ErbB3 агентов со стандартными ингибиторами ErbB2 [2].

При разработке белкового терапевтического препарата термическая стабильность является одним из наиболее важных критериев [3]. В настоящей работе был проведен полный термодинамический анализ одноцепочечного VHH-антитела к внеклеточному домену рецептора ErbB3. Оно было отобрано путем иммунизации лам и последующего фагового дисплея.

Денатурацию глобулярного белка можно описать следующим выражением:

$$F + U = 1, U = F \exp(\frac{-\Delta G(T)}{RT}), \tag{1}$$

где F – доля молекул белка в нативном состоянии, U – в денатурированном состоянии, $\Delta G(T)$ – свободная энергия перехода.

В свою очередь свободная энергия денатурации может быть записана формулой

$$\Delta G(T) = \Delta H_m (1 - \frac{T}{T_m}) + \Delta C_p (T - T_m - T \ln \frac{T}{T_m}), \qquad (2)$$

где T_m – температура плавления белка, ΔH_m – энтальпия перехода, ΔC_p – изменение теплоемкости.

Для смещения равновесия в биохимии часто используют разного рода денатурирующие вещества. Для глобулярных белков свободная энергия денатурации линейно зависит от концентрации мочевины [4]:

$$\Delta G(T, [\text{Urea}]) = m([\text{Urea}]_{1/2}(T) - [\text{Urea}]), \tag{3}$$

где [Urea] – концентрация мочевины, [Urea] $_{1/2}(T)$ – концентрация мочевины в середине кривой денатурации при T.

В заключение, в данной работе был проведен полный термодинамический анализ нового одноцепочечного VHH-антила против человеческого рецептора ErbB3. Анализ кривых флюоресценции позволил определить параметры фазового перехода в белке: свободную энергию, энтальпию, температуру плавления и изменение теплоемкости. Данные величины совпали в пределах погрешности с измеренными методом дифференциальной сканирующей калориметрии. Исследованное антитело показало высокую термодинамическую стабильность ($T_m = 76$ °C).



Рис. 1. Кривые денатурации однодоменного антитела VHH-1 мочевиной для нескольких температур, полученные из измеренных спектров флюоресценции белка. Аппроксимация кривых позволила

определить параметры *m* и [Urea]_{1/2,} далее вычислить ΔG для каждой температуры. В итоге были получены термодинамические характеристики перехода $\Delta H_{\rm m}$, $\Delta C_{\rm p}$ и $T_{\rm m}$

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (уникальный идентификатор RFMEFI57716X0217, Соглашение № 14.577.21.0217).

Литература

- 1. Поляновский О.Л., Лебеденко Е.Н., Деев С.М. // Биохимия. 2012. Т. 77, вып. 3. С. 289–311.
- 2. Kol A., van Scheltinga A.G.T., Timmer-Bosscha H., Lamberts L.E., Bensch F., de Vries E.G.E., Schröder C.P. // Pharmacol. Ther. 2014. V. 143. P. 1–11.
- 3. Manning M.C., Chou D.K., Murphy B.M., Payne R.W., Katayama D.S. // Pharm. Res. 2010. V. 27. P. 544–575.
- Shaw K.L., Scholtz J.M., Pace C.N., Grimsley R.G. Determining the Conformational Stability of a Protein Using Urea Denaturation Curves. / Shriver J. (ed.) // Protein Structure, Stability, and Interactions. Methods in Molecular Biology. V. 490. P. 41–55. Humana Press, 2009.

УДК 577.322.9

Knowledge-based prediction of protein-ligand interactions

M. Kadukova^{1,2}, S. Grudinin², V. Chupin¹

¹Moscow Institute of Physics and Technology

²Inria, Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, LJK, Grenoble, 38000, France

New methods for accurate and computationally simple description of protein-ligand interactions are still demanded by industry and academia to unveil the activity of macromolecular biological targets and their binders. A commonly used approach for such predictions is molecular docking, which generally requires so-called scoring functions to estimate the binding affinity of the protein-ligand complexes. We have developed tools to first parametrize small molecules [1] and then to train a free-shape distance-dependent protein-ligand potential called Convex-PL [2]. Unlike knowledge-based scoring functions based on Boltzmann statistics, we do not impose any functional form of the potential. Instead, we use an optimization approach, accepting that the target binding energy value is decomposed into a polynomial basis with unknown expansion coefficients. These are derived from the structural data with a convex optimization procedure. We have already implemented this principle for successful predictions of protein-protein binding³. The training set consists of the complexes taken from the PDBBind database. We generate false poses with constant low RMSD rigid-body deformations of the ligands inside the binding pockets. This allows the obtained potential to be unbiased towards other molecular docking methods, which are often used for training decoys generation.

Convex-PL performed successfully in the recent CSAR 2013-2014, D3R 2015-2016 and D3R 2016-2017 competitions [4, 5, 6], where we have integrated it into the Autodock Vina docking program. For a more general validation, we assessed Convex-PL using data from the CASF 2013 study⁷. Here, it outperforms 20 other scoring functions in pose prediction, although the results of the virtual screening-emulating test were rather average. The parametrization is available at https://team.inria.fr/nano-d/software/knodle. Convex-PL protein-ligand potential is available at https://team.inria.fr/nano-d/software/Convex-PL.

This study was partially supported by the Russian Foundation for Basic Research (16-04-01264).

References

- 1. Kadukova, M.; Grudinin, S. Knodle: A Support Vector Machines-Based Automatic Perception of Organic Molecules from 3D Coordinates. // J. Chem. Inf. Model., 2016
- Kadukova, M.; Grudinin, S. Convex-PL: a novel knowledge-based potential for protein-ligand interactions deduced from structural databases using convex optimization. // J. Comput.-Aided Mol. Design., 2017

- 3. Neveu, E.; Ritchie, D.W.; Popov, P.; Grudinin, S. PEPSI-Dock: a detailed data-driven protein-protein interaction potential accelerated by polar Fourier correlation. // Bioinformatics, 2016
- Grudinin, S.; Popov, P.; Neveu, E.; Cheremovskiy, G. Predicting Binding Poses and Affinities in the CSAR 2013–2014 Docking Exercises Using the Knowledge-Based Convex-PL Potential. // J. Chem. Inf. Model., 2015
- 5. *Grudinin, S.; Kadukova, M.; Eisenbarth, A.; Marillet, S.; Cazals, F.* Predicting binding poses and affinities for protein-ligand complexes in the 2015 D3R Grand Challenge using a physical model with a statistical parameter estimation. // J. Comput. Aided Mol. Des., 2016
- Kadukova, M.; Grudinin, S. Docking of small molecules to farnesoid X receptors using AutoDock Vina with the Convex-PL potential: lessons learned from D3R Grand Challenge 2. // J. Comput. Aided Mol. Des., 2017
- 7. Li, Y.; Han, L.; Liu, Zh.; Wang, R. Comparative assessment of scoring functions on an updated benchmark: 2. Evaluation methods and general results. // J. Chem. Inf. Model., 2014

Секция проблем квантовой физики, электрофизики, квантовой радиофизики и проблем физики и астрофизики

УДК 532.517.4

Симметрия распределения тензора скоростей деформации в случайных изотропных несжимаемых потоках

А.В. Копьев

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Рассматриваются свойства симметричной части тензора градиентов скорости, называемого тензором скоростей деформации, в развитом турбулентном потоке несжимаемой жидкости. На основании анализа численных данных [1, 2] обнаружена симметрия распределения тензора в однородном изотропном турбулентном потоке. Аналогичная симметрия получена аналитически для случая гауссового распределения скоростей [3].

Используя аналитическое выражение симметрии, удается показать, что функция распределения нормированного собственного значения тензора [4, 5] имеет универсальный характер в обоих случаях.

Показано, что искажение симметрии распределения для малоинтенсивных пульсаций может быть связано с влиянием гауссовой крупномасштабной силы (или иного стохастического источника, поддерживающего стационарность потока), поскольку имеет ярко выраженный гауссов характер.

Работа поддержана грантом РНФ 17-11-01271.

Литература

- 1. *Perlman E., Burns R., Li Y. and Meneveau C.* Data Exploration of Turbulence Simulations using a Database Cluster // Supercomputing SC07. 2007. ACM. IEEE.
- Li Y., Perlman E., Wan M., Yang Y., Burns R., Meneveau C., Burns R., Chen S., Szalay A. & Eyink G. A public turbulence database cluster and applications to study Lagrangian evolution of velocity increments in turbulence // Journal of Turbulence. 2008. V. 9. N 31.
- 3. *Shtilman L., Spector M., Tsinober A.* On some kinematic versus dynamic properties of homogeneous turbulence // J. Fluid Mech. 1993. V. 247. P. 65–77.
- 4. *Kerr R.M.* Histograms of helicity and strain in numerical turbulence // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. № 7. P. 783–786.
- 5. *Lund T.S., Rogers M.M.* An improved measure of strain state probability in turbulent flows // Phys. Fluids. 1994. V. 6. N 5. P. 1839–1847.

УДК 535.354+621.373.8

Оптические свойства периодических структур, созданных методом STED-DLW фотолитографии

Р.Д. Звагельский¹, Д.А. Колымагин¹, Д.А. Чубич¹, А.Г. Витухновский^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Методы современной технологии поверхностно-усиленного инфракрасного поглощения SEIRA (Surface-Enhanced Infrared Absorption) позволяют увеличивать чувствительность до 5 порядков в сравнении с общепринятыми методами ИК-спектроскопии путем использования металлической гранулярной подложки [1]. Маску для

создания таких оптических антенн на основе структур с периодическим распределением штрихов возможно создать при помощи прямого лазерного письма (DLW). Данный метод основан на явлении полимеризации при освещении фоторезиста сфокусированным излучением фемтосекундного лазера. При этом разрешение прямого лазерного письма ограничено дифракционным пределом, преодоление которого может значительно улучшить качество получаемой маски.

Разрешение прямого лазерного письма при постоянной длине волны возбуждения можно повысить, если использовать идею STED (STimulated Emission Depletion – гашение вынужденным излучением) для уменьшения аксиального и латерального размеров эффективно возбужденной области. Суть метода заключается в использовании второго лазера – лазера гашения с определенной конфигурацией электромагнитного поля (11 мода Лаггер–Гаусса) – для стимулирования излучательных переходов по краю фокального пятна, то есть для уменьшения размера возбужденной области путем использования поля тушения.

Следует отметить, что использование идеи STED в люминесцентной микроскопии было отмечено в 2014 г. Нобелевской премией по химии (S. Hell). На сегодняшний день в микроскопии продемонстрировано разрешение 2.4 нм при использовании света с длиной волны 775 нм [2].

В дальнейшем созданный при помощи фотолитографии шаблон металлизируется методом взрывной литографии (lift-off литографии) с образованием серебряной/золотой структуры и исследуются ее оптические свойства.

Создана установка для STED-DLW фотолитографии на основе фемтосекундного Ti:Sapphire-лазера с перестраиваемой длиной волны излучения 720–860 нм и длительностью импульса 50 фс, а также непрерывного лазера гашения с длиной волны 532 нм [3].

С помощью улучшенной технологии прямого лазерного письма были созданы периодические структуры. Морфология полученных структур была исследована с помощью сканирующей электронной микроскопии и атомно-силовой микроскопии, а также были исследованы их оптические свойства при помощи фурье-спектрометрии и сканирующей лазерной конфокальной микроскопии. Проведено сопоставление оптических свойств тестовых структур с учетом их морфологических особенностей.

Исследование проведено при поддержке РНФ (проект №17-79-20418), изучение спектральных свойств выполнялось в рамках проекта РФФИ № 17-02-01408.

Литература

- 1. Jahn M., Patze S., Hidi I.J. [et al.]. Plasmonic nanostructures for surface enhanced spectroscopic methods // Analyst 2016. V. 141. P. 756–793.
- 2. Hell S.W. // Angew. Chem. Int. Ed. 2015. V. 54. P. 8054-8066.
- 3. *Vitukhnovsky A.G., Chubich D.A., Eliseev S.P.* [*et al.*]. Advantages of STED-Inspired 3D Direct Laser Writing for Fabrication of Hybrid Nanostructures // J. of Russ. Laser Res. 2017. 38:375.

УДК 535.371

Люминесценция β-дикетонатных комплексов на основе трехзарядного иона гольмия

Д.А. Комиссар¹, М.Т. Метлин², С.А. Амброзевич^{1,2,3}, И.В. Тайдаков²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

³Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

В работе изучены люминесцентные свойства β -дикетонатных комплексов на основе трехзарядного иона Ho³⁺. С помощью спектроскопических измерений удалось установить структуру уровней и переходы, принимающие участие в люминесценции.

Комплексы лантанидов с различными органическими лигандами зачастую обладают интересными люминесцентными свойствами, что связано с так называемым «антенным эффектом», сущность которого заключается в поглощении возбуждающего излучения органической частью молекулы и последующей передаче энергии на центральный ион [1–3]. Благодаря этому эффекту удается решить проблему малого сечения поглощения свободных ионов Ln(III) и многократно увеличить интенсивность люминесценции. Исследуемые соединения могут представлять интерес для создания эмиссионных и вспомогательных слоев в различных оптоэлектронных устройствах.

В спектрах фотолюминесценции различных комплексов (1–5) наблюдались несколько максимумов (рис. 1). Наиболее интенсивная полоса люминесценции комплексов лежит в области 660 нм, что соответствует переходу ${}^{5}F_{5} \rightarrow {}^{5}I_{8}$ (658 нм) в ионе Ho³⁺ [4].

При исследовании временных зависимостей релаксации люминесценции соединений гольмия(III) (рис. 2) с помощью деконволюции экспериментальных данных методом Левенберга–Марквардта были выделены два элементарных процесса затухания с характерными временами 2 нс и 13 нс. Длительная компонента, скорее всего, соответствует процессу передачи электронного возбуждения на ион Ho³⁺ и его люминесценции, а короткое время, по-видимому, соответствует флуоресценции лиганда.

С уменьшением длины волны регистрации люминесценции комплексов от 650 до 435 нм наблюдается уменьшение амплитуды компоненты с большим временем релаксации и рост амплитуды компоненты с коротким временем релаксации. Такое же поведение наблюдается и при увеличении регистрируемой длины люминесценции от 650 до 685 нм. В области 650 нм компонента с более продолжительным временем релаксации дает максимальный вклад.



Рис. 1. Спектры фотолюминесценции различных металлоорганических комплексов на основе иона Но³⁺ (1–5) при оптическом возбуждении 365 нм (3.4 eV)



Рис. 2. Временные зависимости интенсивности люминесценции при импульсном возбуждении 376 нм (3.29 eV) комплекса 1 при регистрации в различных спектральных диапазонах

Литература

- 1. *Binnemans K.* Rare earth betadiketonates // Handbook of the Physics and Chemistry of Rare Earths. New York: Elsevier, 2005. V. 35. P. 107.
- 2. Eliseeva S.V., Bünzli J.C.G. // Chem. Soc. Rev. 2010. V. 39. P. 189.
- 3. Binnemans K. // Chem. Rev. 2009. V. 109. P. 4283.
- 4. *Basudeb K.* IRRS, UV-Vis-NIR absorption and photoluminescence upconversion in Ho³⁺doped oxyfluorophosphate glasses // J. Solid State Chem. 2005. V. 178(9). P. 2663–2672.

УДК 533.9.082

Анализ интерферограмм, полученных на малых плазменных объектах

А.И. Хирьянова¹, С.И. Ткаченко^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет) ² Объединенный институт высоких температур РАН

Регистрация динамики быстропротекающих (единицы, десятки наносекунд) образовании процессов при мелкомасштабных (десятки микрон) структур на предпробойной стадии высоковольтных разрядов газе требует В высокого пространственного и временного разрешения. Методы лазерного зондирования могут обеспечить необходимое разрешение и по времени, и по пространству. В основе интерферометрического лазерного зондирования, широко использующегося в таких исследованиях [1], лежит формирование интерференционной картины суперпозицией двух отражений пучка, прошедшего через объект [2].

Задача восстановления плотности объекта по сдвигу интерференционных полос (решение уравнения Гельмгольца с переменным коэффициентом) аналитически неразрешима, а потому решается либо графическими [3], либо численными методами [4]. Однако в случае исследований динамики взрыва острия катода [5] графический метод неприменим из-за недостаточной точности анализа данных; кроме того, для учета возможности возникновения дифракционных эффектов на малых объектах необходимо использовать численные методы.

В настоящей работе предлагается использование метода плавных возмущений [6, 7], описывающего распространение электромагнитной волны в неоднородной среде в параболическом приближении с помощью уравнения Гельмгольца. Верификация метода проводится последовательным прямым моделированием сдвига фазовой линии, восстановлением плотности объекта по полученной картине и сопоставлением результатов с исходными данными.

Для оценки влияния расфокусировки оптической системы на интерференционную картину проводится анализ тестовых линий сдвига интерференционной полосы. Показано, что для объектов диаметром 20 мкм при расфокусировке менее 100 мкм метод позволяет восстановить структуру объекта. Получены требования, предъявляемые к исходным данным алгоритма, которые необходимо выполнить при предварительной обработке фазовой картины.

Литература

- 1. Зайдель А.Н., Островская Г.В. Лазерные методы исследования плазмы. Л.: Наука, 1977. 219 с.
- Pikuz S.A., Romanova V.M., Baryshnikov N.V., <u>Min Hu</u>, Kusse B.R._A simple air wedge shearing interferometer for studying exploding wires // Rev. of Sci. Instr. 2001. 72. P. 1098.
- 3. Brinkman H. Optische studie van de electrische Lichtboog // Thesis, University of Utrecht. 1938. P. 85.
- 4. *Bockasten K.* Transformation of observed radiances into radial distribution on the emission of a plasma // J. Opt. Soc. Amer. 1969. 51. P. 943.
- 5. <u>Паркевич Е.В., Ткаченко С.И.</u>, <u>Агафонов А.В.</u>, <u>Мингалеев А.Р.</u>, <u>Романова В.М.</u>, <u>Шелковенко Т.А.</u>, <u>Пикуз С.А.</u> Исследование предпробойной стадии газового разряда в диоде с острийным катодом с помощью лазерного зондирования // ЖЭТФ. 2017. Т. 151, № 4. С. 627–636.
- 6. *Рытов С.М., Кравцов Ю.А., Татарский В.И.* Введение в статистическую радиофизику, часть 2. М.: Наука, 1978. 302 с.
- 7. *Кухта В.Р., Лопатин В.В., Петров П.Г.* Восстановление профиля диэлектрической проницаемости симметричных объектов по интерферометрическим данным // Опт. и спектр. 1984. Т. 56, № 1. С. 178.

УДК 533.92, 539.184.5

Исследование процессов резонансной трехчастичной и диссоциативной электрон-ионной рекомбинации в плазме, содержащей атомарные и молекулярные ионы

К.С. Кислов, А.А. Нариц, В.С. Лебедев

Московский физико-технический институт (государственный университет) Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Изучение процессов электрон-ионной рекомбинации на ридберговские уровни играет важную роль в целом ряде задач, связанных с исследованиями в таких областях, как атомная спектроскопия, физика лазеров, диагностика астрофизической И низкотемпературной плазмы. Известно, что в плотной низкотемпературной плазме подобная рекомбинация происходит по большей части в результате трехчастичных столкновений с участием свободных электронов или нейтральных частиц. Ввиду дальнодействующего характера кулоновского взаимодействия, столкновения с электронами обычно играют гораздо более важную роль в рекомбинационных процессах по сравнению с нейтральными частицами [1, 2]. Следует однако отметить, что вклад нейтральных частиц значительно возрастает в том случае, когда имеется канал резонансного де-возбуждения ридберговских состояний атомами буферного [3] или собственного газа [4].

Исследуемые в данной работе процессы прямого захвата в результате трехчастичных столкновений и диссоциативной рекомбинации можно записать в следующем виде:

$$A^{+} + e + B \to BA^{+}(i) + e \to BA(f, nl) \to A(nl) + B, \tag{1}$$

$$BA^{+}(i, vJ) + e \to BA(f, nl) \to A(nl) + B.$$
⁽²⁾

В работе рассматривались системы (A^+, e, B) при условиях, допускающих одновременное существование атомарных ионов A^+ и молекулярных ионов BA^+ . Основные цели исследования состояли в сравнительном анализе вкладов процессов (1) и (2) в формирование ридберговских состояний, а также в изучении зависимости полной константы скорости захвата от значений электронной и газовой температуры.

В рамках используемой модели рассматривается система из квазимолекулярного иона A^+B и электрона, взаимодействие между которыми на больших расстояниях описывается кулоновским законом. Дифференциальное сечение захвата $\frac{d\sigma_{nl,\varepsilon}^{cap}(E)}{d\Omega}$ [см⁴·c] (ε – кинетическая энергия электрона, E – кинетическая энергия относительного движения ядер) рассчитывается с использованием теории возмущений. Соответствующая константа скорости захвата $K_{nl}^{cap}(T_e, T_{gas}) = \langle v_e \langle V \sigma_{nl,\varepsilon}^{cap}(E)_{T_{gas}} \rangle_{T_e}$ [см⁶·c⁻¹] рассчитывается путем усреднения по функциям распределения скоростей сталкивающихся частиц.

Для широкого круга систем, включая $H^+ + H$ и $Rg^+ + Rg$ (Rg – инертный газ), выполнены расчеты полной константы рекомбинации электронов на уровень nl и на совокупный уровень n. Исследована зависимость этих величин от значений газовой и электронной температуры. Установлено, что значения констант скорости захвата убывают с ростом газовой температуры. Зависимость константы скорости захвата от электронной температуры определяется соотношением между величиной kT_e и глубиной D_0 основного терма квазимолекулярного иона A^+B : если $D_0 \gg kT_e$, то константа скорости растет с ростом электронной температуры, и обратно в обратном случае. Для систем $Rg^+ + Rg$ было установлено, что в зависимости константы скорости захвата от величины *n* наблюдается максимум, определяемый формой термов квазимолекулярного иона A^+B .

Для системы $H^+ + H$ было проведено сравнение эффективности процессов резонансной рекомбинации и рекомбинации при тройных столкновениях с участием двух электронов $A^+ + e + e \rightarrow A(nl) + e$. Установлено, что в условиях астрофизической плазмы константа скорости резонансных процессов многократно превосходит константу скорости рекомбинации при тройных столкновениях с участием двух электронов.

Предложенная в данной работе модель позволяет сравнить вклады процессов трехчастичной и диссоциативной рекомбинации в формирование ридберговских *n*-состояний атомов при различных значениях $T_{\rm gas}$ и $T_{\rm e}$. Полученные результаты говорят о том, что вклад диссоциативной рекомбинации убывает с ростом газовой температуры $T_{\rm gas}$ и возрастает с ростом электронной температуры $T_{\rm e}$. Также было установлено, что вклады рассматриваемых процессов существенно зависят от глубины основных термов квазимолекулярных ионов A^+B : чем меньше глубина ямы, тем выше соответствующий вклад процесса резонансного трехчастичного захвата. Например, для системы $ArXe^+$ с глубиной ямы $D_0 = 176$ мэВ при $T \sim 500$ К более эффективным оказывается механизм диссоциативной рекомбинации, в то время как для системы $NeXe^+$ с глубиной ямы $D_0 = 36$ мэВ при тех же условиях преобладает механизм резонансного трехчастичного захвата.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 14-22-00273).

- 1. *Bates D.R. and Dalgarno A.* Atomic and Molecular Processes / edited by D.R. Bates. New York: Academic Press, 1962.
- 2. Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука, 1982. 378 с.
- 3. *Ivanov V.A., Lebedev V.S., and Marchenko V.S.* Collisional quenching of Rydberg atomic levels and electron-ion recombination in a buffer noble gas // Sov. Phys. JETP. 1988. 67. 2225.

4. *Marchenko V.S.* High-excited atom relaxation and atomic ions in intrinsic gas // Sov. J. Chem. Phys. 1987. 4. 963.

УДК 533.92, 539.184.5

Образование атомов в ридберговских состояниях в тройных столкновениях электрон-ион-атом

К.С. Кислов, А.А. Нариц, В.С. Лебедев

Московский физико-технический институт (государственный университет) Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

В работе были рассмотрены процессы формирования высоковозбужденных (ридберговских) атомов в результате тройных столкновений с участием нейтральных возмущающих частиц: $A^+ + B + e \rightarrow A(nl) + B$. Изучение подобных процессов играет важную роль при исследованиях в таких областях физики, как атомная спектроскопия, астрофизика и кинетика низкотемпературной плазмы (см. [1, 2]).

В данной теоретической работе исследован нерезонансный механизм захвата электронов в ридберговские состояния атомов путем тройных столкновений с возмущающими частицами. Для описания изучаемого процесса было использовано соотношение детального баланса, которое позволило связать сечения двух взаимно обратных процессов: ионизации и рекомбинации. Следуя работам [3, 4], в которых были исследованы процессы ионизации высоковозбужденных атомов при столкновениях с нейтральными частицами, и используя импульсное приближение [5], была получена общая формула для сечения рекомбинации при тройных столкновениях $A^+ + B + e$. На основании полученных формул было выведено выражение для константы скорости рекомбинации $K_{nl}^{cap}(T_e, T_{gas}) = \langle v_e \langle V \sigma_{nl,\epsilon}^{cap}(E \rangle_T \rangle_{T_e} [cm^6 \cdot c^{-1}] (T - газовая температура и <math>T_e$ – температура электронов).

С использованием разложения О'Малли для амплитуды рассеяния [6] были получены аналитические выражения для сечения рекомбинации. Показано, что при использовании приближения длины рассеяния и ряда дополнительных упрощений выражение для константы скорости рекомбинации принимает простой аналитический вид.

Конкретные расчеты сечений и констант скоростей рекомбинации в результате тройных столкновений с участием возмущающих нейтральных частиц были проведены для систем: $He^+ + He^- + e$, $H^+ + H^- + e$ и $Ar^+ + Xe^- + e$. Изучена зависимость указанных физических величин от квантовых чисел nl, газовой температуры T и температуры электронов T_e . Проведено сравнение констант скоростей захвата для рассматриваемого процесса и резонансного процесса диссоциативной рекомбинации $(A^+B)^- + e^- \rightarrow A(nl)^+ + B$. Было установлено, что при низких значениях n и газовой температуры T преобладает резонансный механизм захвата, однако значения его константы скорости убывают с ростом данных параметров, и при высоких n механизм тройных столкновений с участием нейтральных частиц начинает доминировать. Также установлено, что резонансный механизм преобладает при высоких значениях электронной температуры T_e . На рис. 1 представлены зависимости констант скоростей указанных механизмов в формирование ридберговских уровней от числа n атома водорода при T = 1000 K и $T_e = 5000$ K.

Определены критерии применимости использованных в работе приближений. Получены упрощенные выражения для сечений и констант скоростей захвата на уровень nl, обеспечивающие высокую точность (~5%) в широком диапазоне значений n (~ 100). Показано, что константа скорости захвата на совокупный уровень n возрастает с ростом T как T^2 и убывает с ростом T_e как $T_e^{-3/2}$.



Рис. 1. Константы скорости захвата на уровень *n* атома водорода при *T* = 1000 К и *T_e* = 5000 К. Сплошная линия – механизм резонансной рекомбинации, штриховая линия – механизм нерезонансного трехчастичного столкновения с участием нейтрального атома

Литература

- 1. Johnsen R. Three-body mechanisms in plasma recombination of H+ 3 and D+ 3 Ions // EPJ Web of Conferences. 2015. 84. 01003.
- Johnsen R. [et al.]. Ternary Recombination of H3+ and D3+ with Electrons in He-H2 (D2) Plasmas at Temperatures from 50 to 300 K // J. Phys. Chem. A. 2013. 117 (39). P. 9477–9485.
- 3. *Matsuzawa M.* Rydberg States of Atoms and Molecules / Editors RF Stebbings, FB Dunning. Cambridge: Cambridge University Press, 1983. 517 p. Ch. 8. P. 267–314.
- 4. Lebedev V.S. Ionization of Rydberg atoms by neutral particles: I. Mechanism of the perturber-quasifreeelectron scattering. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1991. 24. 1977–1991.
- 5. Chew G.F., Goldberger M.L. The Scattering of Elementary Particles by Complex Nuclei a Generalization of the Impulse Approximation // Phys. Rev. 1952. 87. 778–82.
- 6. O'Malley T.F., Rosenberg L., Spruch L. Low-Energy Scattering of a Charged Particle by a Neutral Polarizable System // Phys. Rev. 1962. 125. 1300.

УДК 535.36; 535.391; 535.015

Моделирование спектров поглощения и рассеяния света золотыми и серебряными нанодисками и нанопризмами

Нгуен Тхань Лам², А.Д. Кондорский^{1,2}, В.С. Лебедев^{1,2}

¹ Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН ² Московский физико-технический институт (государственный университет)

Проведено теоретическое исследование влияния формы серебряных и золотых наночастиц на спектры поглощения и рассеяния ими света. Исследуемые наночастицы имели формы диска, треугольной призмы и призмы с основанием в виде трехлучевой звезды (см. рис. 1). Для проведения численного моделирования процессов рассеяния и поглощения света наночастицами использовался *метод конечных разностей во временной области* (FDTD) для решения уравнений Максвелла.

Размеры наночастиц характеризуются следующими параметрами: диаметром диска D, длиной стороны треугольника L_p , расстоянием между концами лучей звезды L_s , углом раствора луча звезды $\alpha = 10^{\circ}$, а также одинаковой для всех частиц толщиной h.

Расчеты выполнены в видимой и ближней ИК-областях спектра для каждой из трех направлений поляризации падающего света, а затем усреднены по этим направлениям. Таким образом, приведенные здесь результаты относятся к случаю естественно поляризованного падающего света и частиц (нанодисков и нанопризм), случайным образом ориентированных в коллоидном (водном) растворе.

На рис. 2 и 3 проведено сравнение зависимостей сечений экстинкции света σ_{ext} , изучаемыми серебряными и золотыми наночастицами от длины световой волны в вакууме, λ , полученных для размеров $D = L_p$, $= L_s = 20$ нм, h = 4 нм (панель а) и $D = L_p = L_s = 100$ нм, h = 10 нм (панель b). Сечение экстинкции σ_{ext} , представляет собою сумму сечений поглощения и рассеяния света $\sigma_{\text{ext}} = \sigma_{\text{abs}} + \sigma_{\text{scat}}$. Пунктирная кривая на этих рисунках показывает результаты наших расчетов для нанодисков, сплошная кривая – результаты для треугольных нанопризм, а штрих-пунктирная кривая – результаты для нанозвезд.

Из приведенных на рис. 2 и 3 результатов можно заключить, что рассчитанные спектры экстинкции света для наночастиц различной формы существенно отличаются друг от друга. В частности, для одного и того же материала частицы (Ag или Au) и при одних и тех же характерных размерах (h, L) конкретные значения $\lambda_{\rm max}$ и величины сечений экстинкции $\sigma_{\rm ext}$ в максимумах спектральных пиков оказываются сильно зависящими от формы частицы.

В результате проведенных расчетов обнаружено, что наиболее интенсивные спектральные пики как для нанодисков, так и для нанопризм соответствуют продольным (длинноволновым) плазмонным резонансам. При выбранных нами характерных продольных и поперечных размерах частиц, положения максимумов λ_{max} этих спектральных пиков расположены в исследуемом диапазоне длин волн $\lambda = 400-1200$ нм для наночастиц всех трех типов (дисков, призм и звезд). Поперечные (коротковолновые) плазмонные резонансы, отвечающие поляризации света в направлении, перпендикулярном основанию диска (призмы), оказываются для всех геометрических форм рассматриваемых наночастиц на один-два порядка менее интенсивными, чем продольные. Еще одна характерная особенность полученного нами и приведенного на рис. 2 и 3 результата состоит в том, что для призмы с основанием в виде трехлучевой звезды (см. рис. 1 с) длинноволновый плазмонный резонанс оказывается расщепленным на две схожие по интенсивности спектральные компоненты.



Рис. 1. Схематическое изображение исследуемых металлических наночастиц: (a) дисков, (b) треугольных призм, (c) призм с основанием в виде трехлучевой звезды



Рис. 2. Сравнение спектральных зависимостей сечений экстинкции света серебряными наночастицами различной формы. Пунктирная, сплошная и штрих-пунктирная кривые – результаты расчетов для нанодисков, треугольных призм и призм с основанием в виде трехлучевой звезды соответственно. Расчеты выполнены для двух различных наборов геометрических параметров наночастиц (а) $D = L_p$, $= L_s = 20$ нм, h = 4 нм и (b) $D = L_p$, $= L_s = 100$ нм, h = 10 нм



Рис. 3. То же, что и на рис. 2, но для золотых наночастиц

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 15-02-07777).

Литература

- 1. Lebedev V.S., Vitukhnovsky A.G., Yoshida A., Kometani N., and Yonezawa Y. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 2008. 326. 204.
- 2. Лебедев В.С., Медведев А.С., Васильев Д.Н. [и др.]. // Квантовая электроника. 2010. 40. 246.
- 3. Лебедев В.С., Медведев А.С. // Квантовая электроника. 2012. 42. 701.
- 4. Лебедев В.С., Медведев А.С. // Квантовая электроника. 2013. 43. 1065.
- 5. Kondorskiy A.D., Kislov K.S., Lam N.T., Lebedev V.S. // J. Russ. Laser Res. 2015. 36. 175.

УДК 621.373.826

Квазипродольная накачка лазера на красителях зелеными полупроводниковыми лазерами

О.А. Бурдукова^{1,2}, В.А. Петухов^{1,2}, М.А. Семенов²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Появление мощных полупроводниковых лазеров видимого диапазона дает возможность перейти от традиционных источников накачки перестраиваемых лазеров к гораздо более компактной и недорогой диодной накачке. Уже опубликован ряд работ, демонстрирующих успешное осуществление диодной накачки для лазеров на Cr:LiCAF, Cr:LiSAF, Cr:LiSGAF и лазеров на Ti:S. Значительно сложнее дело обстоит с диодной накачкой перестраиваемых лазеров на красителях (ЛК), которые все еще востребованы благодаря их универсальности, так как они позволяют перекрыть диапазон длин волн от 300 нм до 1800 нм (включая зеленую область спектра, которая не перекрывается гармониками Ti:S лазеров). Характерные времена жизни молекул красителей в возбужденном состоянии существенно меньше, чем у выше упомянутых перестраиваемых лазеров, а значит и превысить порог генерации в ЛК сложнее.

Основной проблемой при диодной накачке ЛК является нехватка плотности мощности для возбуждения молекул красителей. До недавнего времени даже в лучших работах КПД не превышал 2%. В 2015 году вышла работа [1], где дифференциальный КПД достигает 11% (краситель – DCM), но с резонатором, непригодным для перестройки длины волны генерации. За последние два года нам удалось не только получить рекордное значение дифференциального КПД (18%) для ЛК с диодной накачкой, но и впервые продемонстрировать перестройку излучения в широком диапазоне длин волн: от 500 нм до 700 нм [2, 3]. Несмотря на значительные успехи, полученные нами при использовании поперечной схемы накачки, продольные схемы представляют особый интерес.

Целью данной работы являлось проведение испытаний по продольной накачке красителя родамин 6Ж с целью достижения лазерного эффекта при импульсном возбуждении зелеными полупроводниковыми лазерами, поскольку родамин 6Ж является наиболее популярным среди фемтосекундных ЛК. Это позволит сделать большой шаг на пути к получению ультракоротких импульсов в ЛК с полупроводниковой накачкой. Наиболее мощными полупроводниковыми лазерами видимого диапазона являются голубые диоды (445 нм), но, к сожалению, родамин 6Ж почти не поглощает на этой длине волны. Поэтому в качестве накачки были выбраны наиболее мощные диоды зеленого диапазона, позволяющие получать до 1 Вт в непрерывном режиме.

Накачка активной среды осуществлялась двумя многомодовыми зелеными (520 нм) диодами NDG7K75 фирмы Nichia. Длительность импульсов накачки составляла 200 нс. Чтобы избежать термооптических искажений в активной среде, частота следования импульсов накачки устанавливалась около 2 Гц. Для первых испытаний была выбрана квазипродольная схема накачки (рис. 1) при фокусировке излучения диодов сферическим зеркалом с радиусом 200 мм. В области перетяжки под углом Брюстера расположена стеклянная кювета с расстоянием между внутренними стенками 0,2 мм, куда заливался раствор родамина 6Ж в этаноле. Оптимальная концентрация красителя подбиралась экспериментально. Астигматизм, обусловленный наличием кюветы под углом Брюстера в области перетяжки, частично компенсировался за счет поворота сферического зеркала с R = 200 мм. Излучение каждого диода коллимируется асферической линзой типа G2 (f = 4,0 мм), затем у одного из диодов с помощью полуволновой пластины поляризация меняется на ортогональную, после чего пучки сводятся вместе поляризационным светоделителем. Так как мощные многомодовые лазерные диоды обладают сильной анизотропией (угловая расходимость по вертикали и горизонтали отличаются в несколько раз), пучок расширялся вдоль «медленной» оси цилиндрическим телескопом и затем фокусировался сферическим зеркалом на кювету с красителем. В результате нам удалось сфокусировать излучение диодов в пятно 20 мкм на 40 мкм.

Измерены генерационные характеристики для родамина 6Ж в широкополосном резонаторе при накачке диодами при разных коэффициентах пропускания выходных зеркал (рис. 2). При использовании зеркала с пропусканием 12% дифференциальный КПД составил 11%, а порог генерации 0,45 мкДж. При максимальной поглощенной энергии накачки в 750 нДж выходная энергия генерации составила 26 нДж. Небольшая энергия генерации обусловлена слабым, а именно в 1,5 раза, превышением над порогом генерации. Этот недостаток можно исправить путем добавления диодов накачки или путем перехода к более короткофокусным сферическим зеркалам, что и предполагается осуществить в дальнейшем.

В результате была впервые получена генерация в ЛК при накачке зелеными диодами.





Рис. 1. Схема трехзеркального резонатора с частичной компенсацией астигматизма и продольной накачкой двумя зелеными диодами



Рис. 2. Зависимости энергии генерации красителя от энергии накачки в широкополосном резонаторе при разном пропускании выходных зеркал

Работа выполнена при финансовой поддержке Президиума РАН, программа «Фундаментальные и прикладные проблемы фотоники и физика новых оптических материалов» (1.25П), а также учебно-научного комплекса ФИАН.

- 1. Zhao Z., Mhibik O., Nafa M., Chenais S., Forget S. High brightness diode-pumped organic solid-state laser // Appl. Phys. Lett. 2015. V. 106. P. 051112.
- Burdukova O., Gorbunkov M., Petukhov V., Semenov M. Diode-pumped dye laser // Laser Phys. Lett. 2016. V. 13. P. 105004.
- Burdukova O., Gorbunkov M., Petukhov V., Semenov M. Diode pumped tunable dye laser // Appl. Phys. B. 2017. V. 123. P. 84.

УДК 530.1

Конформные поля на пространстве анти-де-Ситтера. Метод объемлющего пространства

А.И. Гончарук¹, М.А. Григорьев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Данная работа посвящена исследованию факторизации конформных уравнений высокого порядка над пространством постоянной кривизны. Эти уравнения конформно инвариантные *k*-степени оператора Лапласа над конформно плоским многообразием. Данная факторизация, например, используется в вычислении статсумм для конформных полей [4], т.к. позволяет разбить статсумму исходного оператора на статсуммы для массивных скалярных полей, которые известны. Также она являлась предметом изучения у математиков и находит применение, например, в получении спектра соответствующих GJMS-операторов.

получения Для конформных инвариантов, конформно инвариантных дифференциальных операторов используется конструкция объемлющего пространства, впервые предложенная Дираком для конформно плоского случая и впервые построенная в общем случае в [1]. В этой конструкции рассматривается произвольное конформное многообразие – гладкое многообразие размерности d вместе с классом эквивалентности метрик на нем $(g - h, \text{если}g = \lambda^2 h, \lambda$ – некоторая гладкая функция, принимающая только положительные значения). Затем строится многообразие размерности d + 2 - объемлющеепространство, которое является Риччи-плоским. Рассмотрение конформной геометрии в терминах объемлющего пространства позволило доказать существование GJMSоператоров [2] - конформно инвариантных дифференциальных операторов, и предложен алгоритм их получения.

Существует альтернативная картина – метод производящей формулировки, предложенный в [3], позволяющий получать GJMS-операторы, на данный момент только на конформно плоском фоне. Несомненным достоинством данного метода является возможность прямого обобщения случая скалярного поля на случай произвольного спина.

В данной работе мы строим явно GJMS-операторы на конформно-плоском фоне с помощью метода производящей формулировки, обсуждаем соответствие подхода в [1] и используемого формализма. В частности, при выборе метрики анти-де-Ситтера на конформном многообразии мы воспроизводим известный результат: эти операторы – произведение операторов $A_k A_{k-1} \dots A_1 \forall k \in N$, каждый из которых есть сумма оператора Лапласа и фактора, зависящего от скалярной кривизны. При выборе метрики Минковского на конформном пространстве мы получаем степени оператора Лапласа. В то же время мы хотим выяснить, какие структуры отвечают за возникновение факторизации и обобщить результат на случай конформных калибровочных полей. Также открытым вопросом является обобщение формализма [3] на случай произвольного конформного многообразия, что позволило бы сделать шаг к построении теории конформных высших спинов над произвольным фоном.

- Fefferman C. and Graham C. R. Conformal invariants. Élie Cartan et les mathématiques d'aujourd'hui // The mathematical heritage of Élie Cartan, Sémin. Lyon 1984, Astérisque. No. Hors Sér. 1985. 95– 116.
- Graham C.R., Jenne R., Mason L.J. and Sparling G.A.J.. Conformally invariant powers of the laplacian. i: Existence // Journal of the London Mathematical Society. 1992. s2-46(3). 557–565.
- 3. *Bekaert X. and Grigoriev M.* Higher order singletons, partially massless fields and their boundary values in the ambient approach. // Nucl. Phys. 2013. B876. 667–714.
- Tseytlin A.A. On partition function and Weyl anomaly of conformal higher spin fields // Nucl. Phys. 2013. B877. 598-631.
УДК 535.14

Запутанность между оптическими кубитами, закодированными в квадратурном и поляризационном базисах

Д.В. Сычев¹, А.Е. Уланов^{1,2}, А.А. Пушкина^{1,4}, Е.С. Тиунов^{1,2}, В.А. Новиков^{1,2}, А.И. Львовский^{1,3,4}

¹Российский квантовый центр ²Московский физико-технический институт (государственный университет) ³Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН ⁴Institute for Quantum Science and Technology, University of Calgary

Физические системы, которые могут быть использованы в протоколах квантовой коммуникации и квантовых вычислений, проявляют существенно различные свойства. Это может выражаться в том числе в разном виде энергетического спектра, например у одиночных атомов он дискретный, а у атомных ансамблей – квазинепрерывный. Однако в вышеупомянутых протоколах каждый тип систем пригоден для решения конкретных подзадач, вследствие чего возникает необходимость их совместного использования. В связи с этим становится актуальной задача разработки технологии эффективного взаимодействия между такими системами [1]. На языке квантовой механики это можно переформулировать следующим образом: необходимо научиться передавать квантовые состояния между физическими системами различных типов.

Искать решение данной задачи предлагается с помощью квантовых состояний света. Свет как физическая система может быть описан с помощью двух независимых представлений: как поток фотонов и как электромагнитное поле. Системы с дискретным энергетическим спектром показывают эффективное взаимодействие со светом, проявляющим свойства одиночных фотонов; системы же второго типа – со светом с волновыми свойствами соответственно. Таким образом, поставленная задача сводится к созданию метода установления связи между различными представлениями квантово-оптической системы.

Достичь поставленной цели возможно путем создания квантово-оптических запутанных состояний между двумя системами [2]. Так как квантовая информация представляется в кубитах, то применительно к нашей задаче нужно запутать две такие оптические кубитные системы, базисные состояния которых будут задаваться дискретными и непрерывными степенями свободы, для взаимодействия соответственно с произвольными физическими системами с дискретным и квазинепрерывным спектрами. В первом случае кубитное состояние следует кодировать, например, поляризационным или Фоковским базисами; во втором надлежит производить кодировку состояниями, удобно описываемыми квадратурами, то есть каноническими координатами и импульсом световой моды. В качестве таких состояний можно выбрать когерентные состояния света противоположных амплитуд или их суперпозиционные состояния, так называемые положительные и отрицательные «кошки Шредингера». С помощью такого гибридного запутанного ресурса можно реализовать, например, протокол квантовой телепортации и, таким образом, перевести квантовое состояние из одного представления в другое [3].

В данной работе мы приготавливаем такое запутанное оптическое состояние в следующей форме:

$$|R\rangle = \frac{|H\rangle|\operatorname{cat}_{+}\rangle + |V\rangle|\operatorname{cat}_{-}\rangle}{\sqrt{2}}, \qquad \text{где} \quad |\operatorname{cat}_{\pm}\rangle = \frac{|\alpha\rangle \pm |-\alpha\rangle}{\sqrt{2}}, \qquad (1)$$

то есть дискретная мода кодируется поляризационным состоянием одного фотона (Н – горизонтальная поляризация, V – вертикальная), а непрерывная, или квадратурная – четными и нечетными «кошками Шредингера».

В основе предлагаемого метода лежит протокол, называемый в англоязычной литературе *«entanglement swapping»* [4, 5] – установление запутанности между

подсистемами, которые ранее не имели возможность взаимодействовать и изначально не были квантово-сцеплены. Для характеристики полученного запутанного состояния мы использовали метод гомодинной томографии в квадратурной моде при условии нахождения дискретной моды в конкретном поляризационном состоянии одного фотона. Измерения в непрерывной моде (рис. 1) показывали запутанность получаемого состояния и его соответствие ожидаемому (1).



Рис. 1. Результаты гомодинной томографии квадратурной моды. Функции Вигнера состояний в квадратурной моде *C* при проекции дискретной моды *D* на состояния горизонтально (a), вертикально (b) и диагонально (c, d) поляризованного фотона

- 1. Kurizki G. [et al.]. Quantum technologies with hybrid systems // Proc. Natl. Acad. Sci. 2015.
- 2. Jeong H. [et al.]. Generation of hybrid entanglement of light // Nat. Photon. 2014. 8.
- 3. Ulanov A.E., Sychev D.V., Pushkina A.A., Fedorov I.A., Lvovsky A.I. A scheme for quantum teleportation between discrete and continuous encodings of an optical qubit // Phys. Rev. Lett. 2017. 118.
- 4. Zukowski M., Zeilinger A., Horne M.A., Ekert A.K. «Event-ready-detectors» Bell experiment via entanglement swapping // Physical Review Letters. 1993. 71.

5. *Pan J.-W., Bouwmeester D., Weinfurter H., Zeilinger A.* Experimental Entanglement Swapping: Entangling Photons That Never Interacted // Physical Review Letters. 1998. 80.

УДК 530.145

Особенности локализации и делокализации электронов в молекулах и кристаллах: операциональный подход

А.А. Астахов, В.Г. Цирельсон

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

Представление о локализации и делокализации электронов в атомах, молекулах и кристаллах является одним из важных понятий, позволяющем на качественном уровне объяснять структуру и свойства различных соединений. Вместе с тем это понятие является эмпирическим и недоступным прямому наблюдению. Показано [1], что существует взаимосвязь между локализацией электронов и оптическими свойствами электронной системы, что позволяет определить степень локализации электронов через линейный отклик этой системы на внешнее поле. Такой подход называют операциональным. В данной работе этот подход распространен на пространственно-распределенные свойства локализации и делокализации электронов. Отправной точкой служит тот факт, что согласно соотношению неопределенностей, увеличение степени пространственной локализации электронов увеличивает квантовые флуктуации их импульсов. С другой стороны, рост делокализации электронов в пространстве можно рассматривать как увеличение степени флуктуаций их координат. Таким образом, квантовые флуктуации полного импульса и полной координаты многоэлектронной системы служат взаимнодополнительными мерами пространственной локализации и делокализации электронов соответственно.

Для реализации данного подхода вводятся понятия пространственнораспределенных плотностей импульса и координат электронов. Нерелятивистский оператор плотности импульса $\hat{P}(\mathbf{r})$ отождествляется с оператором плотности тока $\hat{j}(\mathbf{r})$ в отсутствие внешнего электромагнитного поля. Для системы из *N* электронов

$$\hat{\boldsymbol{P}}(\mathbf{r}) = \frac{m}{e} \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{i}^{N} \{\delta(\hat{\mathbf{r}}_{i} - \mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}_{i}\}, \qquad (1)$$

где $\hat{\mathbf{p}}_i$ – оператор импульса *i*-го электрона. Современные экспериментальные методы позволяют измерить плотность тока на субатомном уровне [2], что означает доступность величины $P(\mathbf{r})$ экспериментальному определению. Оператор плотности координаты $\hat{Q}(\mathbf{r})$ получается из (1):

$$\hat{\boldsymbol{Q}}_{t}(\mathbf{r}) = \frac{1}{m} \int \hat{\boldsymbol{P}}_{t}(\mathbf{r}) dt = \frac{1}{e} \int \hat{\mathbf{j}}_{t}(\mathbf{r}) dt , \qquad (2)$$

где $\hat{Q}_t(\mathbf{r})$ и $\hat{P}_t(\mathbf{r})$ – соответствующие операторы в представлении Гейзенберга. Согласно современной теории поляризации [3], $\hat{\chi}_t(\mathbf{r}) = \int \hat{\mathbf{j}}_t(\mathbf{r}) dt$ есть оператор поляризации электронного континуума. Изменение поляризации электронной системы в результате внешнего возмущения (например наложения переменного электрического поля), действующего во временном диапазоне от t_1 до t_2 , связано с локальным перераспределением пространственного положения электронов и равно $\Delta \chi(\mathbf{r}) = \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{j}_t(\mathbf{r}) dt$. Операторы $\hat{P}(\mathbf{r})$ и $\hat{Q}(\mathbf{r})$ удовлетворяют коммутационному соотношению, обобщающему традиционное квантово-механическое соотношение между импульсом и координатой. В простейшем одномерном случае оно имеет вид

$$[\hat{Q}(x),\hat{P}(x')] = \frac{i\hbar}{e}\hat{\rho}(x)\delta(x-x').$$
(3)

Здесь $\hat{\rho}(x)$ – оператор электронной плотности. Интегрирование выражения (3) по переменным *x* и *x'* по всему пространству приводит к коммутатору $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar N$, как и должно быть.

Для описаний квантовых флуктуаций плотностей импульса (1) и координаты (2) электронной системы в основном состоянии Ψ_0 рассматриваются равновесные корреляционные функции, которые отождествляются с интегральными ядрами дисперсий импульса и координаты:

$$\operatorname{Var}(\mathbf{P};\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{1}{2} \left\langle \Psi_0 \left| \left\{ \Delta \hat{\boldsymbol{P}}(\mathbf{r}), \Delta \hat{\boldsymbol{P}}(\mathbf{r}') \right\} \right| \Psi_0 \right\rangle, \tag{4}$$

$$\operatorname{Var}(\mathbf{R};\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{1}{2} \left\langle \Psi_0 \right| \left\{ \Delta \hat{\boldsymbol{Q}}(\mathbf{r}), \Delta \hat{\boldsymbol{Q}}(\mathbf{r}') \right\} \left| \Psi_0 \right\rangle$$
(5)

(фигурные скобки обозначают антикоммутатор). Обе функции связаны друг с другом соотношением, являющимся обобщением традиционного соотношения неопределенностей. Интегрирование выражений (4) и (5) по одной из пространственных переменных (например по $\mathbf{r'}$) приводит к плотностям дисперсии импульса Var($\mathbf{P};\mathbf{r}$) и дисперсии координаты Var($\mathbf{R};\mathbf{r}$) для электронной системы. Существенно, что эти меры связаны посредством флуктуационно-диссипационной теоремы со спектральными моментами электронного тензора проводимости:

$$\operatorname{Var}(\mathbf{P};\mathbf{r}) = \frac{m^2 \hbar}{2\pi e^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega |\omega| \operatorname{Re} \operatorname{Tr} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r},\omega), \qquad (7)$$

$$\operatorname{Var}(\mathbf{R};\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2\pi e^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega |\omega|^{-1} \operatorname{Re} \operatorname{Tr} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r},\omega) \,. \tag{8}$$

Тензор проводимости $\sigma(\mathbf{r},\omega)$ является хорошо определенной физической величиной и описывает отклик системы на внешнее переменное электрическое поле с частотой ω , следовательно существует принципиальная возможность определить функции Var(**P**;**r**) и Var(**R**;**r**) экспериментально. В силу этого обе функции приобретают четкий физический смысл, поскольку отражают некоторый внутренний флуктуационный процесс, который может быть обнаружен через реакцию системы на внешнее поле.

Мы показываем, что плотность дисперсии импульса $Var(\mathbf{P};\mathbf{r})$ отражает степень локализации электронов в точке \mathbf{r} , а плотность дисперсии координаты $Var(\mathbf{R};\mathbf{r})$ – степень их делокализации. Квантово-химические расчеты, проведенные методом Кона–Шэма на уровне B3LYP/def2-TZVP, позволили визуализировать пространственную локализацию и делокализацию электронов в молекулах и кристаллах. При этом распределение $Var(\mathbf{R};\mathbf{r})$ выявляет регионы внутренних оболочек атомов, валентных электронов химических связей и неподеленных электронных пар (рис. 1).



Рис. 1. Распределение плотности дисперсии координаты Var(**R**;**r**) в молекулах а) ферроцена Fe(C₅H₅)₂ и б) гексакарбонилди-µ-тиоксобижелеза Fe₂(µ-S₂)(CO)₆. Значение изоповерхностей: а) 0.35 а.е. и б) 0.17 а.е. (светло-серая полупрозрачная), 0.45 а.е. (серая), 2.10 а.е. (темно-серая)

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 16-03-00057а.

Литература

- 1. *Resta R.* Why are insulators insulating and metals conducting? // J. Phys.: Condens. Matter. 2002. V. 14. P. 625.
- Lubk A., Béché A., Verbeeck J. Electron microscopy of probability currents at atomic resolution // Phys. Rev. Lett. 2015. V. 115. P. 176101.
- 3. *Resta R*. Electrical polarization and orbital magnetization: the modern theories // J. Phys.: Condens. Matter. 2010. V. 22. P. 123201.

УДК 535.376

Спектры импульсной катодолюминесценции диоксида кремния

Е.В. Есингильдинов^{1,2}, Ю.Д. Заварцев³, М.В. Завертяев¹, А.И. Загуменный³, В.А. Козлов¹, С.А. Кутовой³, Н.В. Пестовский^{1,2}, А.А. Петров^{1,2}, А.А. Родионов^{1,2} и С.Ю. Савинов^{1,2}

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН ²Московский физико-технический институт (государственный университет) ³Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Исследованы спектры ИКЛ образцов SiO₂, содержащих малую концентрацию примесей. Исследованы (1) порошок SiO₂ марки «ЧДА», обладающий аморфной структурой с массовой долей основного вещества не менее 98%; (2) монокристалл *а*-кварца, выращенный гидротермальным методом и содержащий малую концентрацию примесей; (3) кристаллический порошок со структурой *α*-кварца, полученный из части монокристалла *α*-кварца, размолотой в агатовой ступке в порошок с характерным размером частиц 10–100 мкм; (4) порошок SiO₂ с высокой степенью изотопической чистоты. Массовая доля основного вещества в данном соединении – не менее 99,984%, атомная доля изотопа ²⁸Si – не менее 99,91%. Образцы (1), (2) и (4) были дополнительно подвергнуты отжигу на воздухе при температуре 1000 °C в течение шести часов. ИКЛ образца (4) до отжига зафиксировать не удалось из-за недостаточной интенсивности. Исследована ИКЛ данного образца только после отжига.

Все спектры обладают полосой ИКЛ с максимумом интенсивности в области 490– 500 нм. Показано, что полосы ИКЛ монокристалла α-кварца в области 490 и 415 нм относятся к свечению излучателей, распределённых по объёму кристалла, а не связанных с его поверхностью; поведение интенсивности ИКЛ в области 490–500 нм при отжиге близко в случае кристаллического и аморфного образцов, что служит аргументом в пользу общей природы данных полос. Впервые обнаружена структура полосы ИКЛ монокристалла αкварца в области 490 нм (2,5 эВ). Установлено, что структура полосы состоит из трёх пиков с максимумами интенсивности на длинах волн 480 ± 2 нм (2,58 ± 0,01 эВ), 487 ± 2 нм (2,55 ± 0,01 эВ), 493 ± 2 нм (2,52 ± 0,01 эВ). Положения пиков являются эквидистантыми по энергетической шкале. Разности энергий соседних пиков, равные 0,03 ± 0,01 эВ, совпадают в пределах ошибки измерений с энергией оптического фонона в α -кварце [1], а также лежат в области энергий молекулярных колебаний молекулы Li_xO_y [2].

Введём правую прямоугольную декартову систему координат (X, Y, Z) так, чтобы ось Z совпадала с осью симметрии третьего порядка монокристалла α -кварца. Установлено, что излучение ИКЛ монокристалла α -кварца при комнатной температуре в области 490 нм поляризованно в плоскости XY. Структура полосы сохраняется в спектре излучения, поляризованного вдоль оси X. Полученные данные позволили сформуллировать гипотезу о возможной связи полосы в ИКЛ SiO₂ в области 490–500 нм с примесью атомов Li, широко распространённой в SiO₂ в концентрациях ~10⁻⁶ ат.%, а также с формированием в ходе возбуждения ИКЛ короткоживущих комплексов O^{2–}-O[–].

Представлена предположительная схема процессов, приводящая к формированию структуры. Известно [3], что ионы Li⁺ существуют в структуре α -кварца в качестве компенсаторов заряда ионов Al³⁺. В результате облучения кварца при температуре более 200 К ионы Li⁺ могут свободно перемещаться по кристаллу. Плотный поток электронов при комнатной температуре освобождает ионы Li⁺. Далее они восстанавливают свой заряд до нейтрального. Одновременно в результате электронного удара происходит разрыв связи Si-O с образованием немостикового кислорода (нO⁻) с одной ненасыщенной валетной связью. Если рядом с нO⁻ находится атом Li, формируется короткоживущий комплекс нO²⁻-Li⁺, распад которого приводит к формированию люминесценции в области 490 нм, обладающей структурой).

Предложена также другая гипотеза, объясняющая происхождение данной структуры. Ионизация анионов кислорода, несущих заряд 2⁻, в решетке α-кварца приводит к формированию комплексов О²⁻-О⁻, возникающих из-за кулоновского притяжения ионизованного и неионизованного ионов кислорода. Известно, что электрическое поле, обусловленное пьезоэффектом, направлено вдоль оси $X \alpha$ -кварца. Акустические колебания кристалла на частотах оптических фононов обусловливают соответствующую модуляцию находятся комплексы $0^{2^{-}}-0^{-}$. амплитуды электрического поля, В котором Рекомбинационное излучение (СЛ) данных комплексов в таком случае испытывает модуляцию интенсивности на частотах оптических фононов, спектр излучения при этом состоит из центральной (487 нм) и двух боковых (480 и 493 нм) полос.

Работа выполнена при финансовой поддержка грана РНФ №14-22-00273 П.

- 2. *Ichikawa S., Suda J., Sato T., Suzuki Y.* Lattice dynamics and temperature dependence of the first-order Raman spectra for α-SiO₂ crystals // Journal of Raman Spectroscopy. 2003. V. 34. P. 135–141.
- 3. *Walsby C.J., Lees N.S., Claridge R.F.C., Weil J.A.* The magnetic properties of oxygen hole aluminum centres in crystalline SiO₂. VI: A stable AlO₄/Li centre // Can. J. Phys. 2003. V. 81. P. 583–598.

^{1.} *Koput J., Peterson K.A.* The ab initio potential energy surface and vibrational-rotational energy levels of dilithium monoxide, Li₂O // Journal of Chemical Physics. 2002. V. 116, N 21. P. 9255–9260.

УДК 537.531.2

Многоканальный сцинтилляционный комплекс диагностик для исследований рентгеновского и гамма-излучений предпробойной стадии протяженного атмосферного разряда установки ЭРГ

А.А. Родионов^{1,2}, А.В. Агафонов², А.В. Огинов², К.В. Шпаков², И.С. Байдин²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Исследования излучений атмосферного разряда, ведущиеся на установке ЭРГ (ФИАН) [1–6], показали необходимость развития и совершенствования сцинтилляционных диагностик, обусловленных низкофоновой регистрацией импульсов малой длительности рентгеновского и гамма-излучений (рис. 1) с энергией квантов от десятков кэВ до нескольких МэВ, а также нейтронного излучения. При этом важно улучшить максимально достижимое временное и амплитудное разрешение используемых типов фотоумножителей, что возможно при использовании современной элементной базы [7].

Представлены подходы к созданию «быстрых» детекторов излучений на базе отечественных ФЭУ-30 (временное разрешение ~5 нс) в сборке со сцинтилляторами разных типов. Для устранения нестабильности работы ФЭУ, связанной с высокой средней загрузкой и нарушением линейности при импульсном отклике, делители питания были детектор оптимизированы по методикам [8], а каждый запитывался ОТ усовершенствованных отдельных источников питания. Особое внимание уделялось экранировке от сильных электромагнитных наводок, возникающих в момент разряда, для чего элементы конструкции корпусов были выполнены из пермаллоевого сплава 79НМ.

С помощью сборок усовершенствованных сцинтилляционных детекторов проведены экспериментальные исследования анизотропии жесткого рентгеновского излучения, длительность которого изменяется от сотен наносекунд до предела, соответствующего максимальному временному диапазону измерения данных детекторов. С использованием ступенчатых фильтров оценены максимальные энергии гамма-квантов, возникающих во время атмосферного разряда. Статистические данные, собранные во время последовательных серий экспериментов, позволяют утверждать о наличии жестких излучений, их анизотропном характере и связи с характерными особенностями поведения тока и напряжения в начальной фазе атмосферного разряда. Приведены результаты серий экспериментов.



Рис. 1. Анизотропия рентгеновского и гамма излучений. Типичные осциллограммы сигналов сцинтилляционных детекторов по каждому из десяти направлений

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты РФФИ № 17-08-01690 и № 18-38-00230).

Литература

 Agafonov A.V., Oginov A.V., Shpakov K.V. Prebreakdown phase in atmospheric discharges // Physics of Particles and Nuclei Letters. 2012. V. 9, N 4–5. P. 380–383.

- <u>Agafonov</u> A.V., <u>Bagulya</u> A.V., <u>Dalkarov</u> O.D., <u>Negodaev</u> M.A., <u>Oginov</u> A.V., <u>Rusetskiy</u> A.S., <u>Ryabov</u> V.A., <u>Shpakov</u> K.V. Observation of neutron bursts produced by laboratory high-voltage atmospheric discharge // Physical review letters. 2013. V. 111, N 11. P. 115003.
- Agafonov A.V., Bogachenkov V.A., Chubenko A.P., Oginov A.V., Rodionov A.A., Rusetskiy A.S., Ryabov V.A., Shepetov A.L., Shpakov K.V. Observation of hard radiations in a laboratory atmospheric highvoltage discharge // J. Phys. D: Appl. Phys. 2017. 50. 165202.
- Oginov A.V., Kurilenkov Yu.K., Samoylov I.S., Shpakov K.V., Tarakanov V.P., Ostashev V.E., Rodionov A.A., Karpukhin V.T. Recent experimental study of DD fusion in the potential well of a virtual cathode at nanosecond vacuum discharge // J Phys CS (Эльбрус 2016) (ISBN 978-5-7558-0567-4).
- 5. Agafonov A.V., Oginov A.V., Rodionov A.A., Shpakov K.V. Current filaments in a long spark in air // Program of the 42nd IEEE International Conference on Plasma Science (ICOPS2015), May 24-28, Belek, Antalya, Turkey, 1P-12. P. 43.
- Agafonov A.V., Baidin I.S., Oginov A.V., Rodionov A.A. and Shpakov K.V. Radiations in lightning-like atmospheric discharges // Book of Abstracts of International Symposium Topical Problems of Nonlinear Wave Physics (NWP-2017), 22 – 28 July, 2017, Moscow–St. Petersburg, Russia. P. 133.
- 7. Baldakin B.O., Ronzhin A.P., Cisek Z. // Preprint. PI3-7859. Dubna. 1974.
- 8. Basiladze S.G., Ivanov V.I. // Preprint. 13-9172. Dubna. 1975.

УДК 535.376

Органические светоизлучающие диоды на основе комплексов тербия с использованием новых хост материалов

Д.О. Горячий¹, А.А. Ващенко^{1,2}, А.Н. Асландуков³, В.В. Уточникова³

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ² Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

³Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Комплексы редкоземельных металлов являются перспективными люминесцентными материалами для органических светоизлучающих устройств (ОСИД). Обычно они обладают достаточно низкой проводимостью, поэтому общепринятой практикой является включение редкоземельных комплексов в проводящую хост-матрицу. Подбор подходящего хост-материала является ключевой задачей для получения эффективного ОСИД.

В ходе нашего исследования было протестировано около двадцати хостматериалов, из которых отобрано четыре наиболее перспективных (рис. 1). Использование данных материалов позволило существенно повысить яркость исследуемых ОСИД. В качестве люминесцентного центра использовался синтезированный нами ранее Tb(pobz)₃(H₂O)₂[1] с квантовым выходом 96%. Прототипы светодиодов на основе отобранных материалов продемонстрировали наличие эффективной электролюминесценции. Используя хост 4 в светодиоде нам удалось получить яркость 25 кд/м².

1



/

2





Рис.1. Тернарные комплексы Tb L₃(Q), где L – Cl или pobz, а Q – представленные на рисунке материалы

Литература

 Thin Films of Tb(pobz)₃ (Hpobz = 2-phenoxybenzoic acid): Reactive CVD and Optical Properties // ECS Transactions. 2009. 25 (8). 1107–1114.

Секция современных проблем теоретической физики и физики конденсированного состояния

УДК 538.955

Модель Китаева с возмущением: спектр возбуждений и спиновые корреляционные функции на больших расстояниях

А.В. Лункин

Московский физико-технический институт (государственный университет) Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН Сколковский институт науки и технологий

Для модели Китаева [1] на шестиугольной решётке с различными типами возмущений был разработан метод подсчёта корреляционной функции спин-спин в инфракрасном пределе. Было показано, что задача о подсчёте данной функции может быть сведена к задаче о нахождении корреляционной функции квадратичных операторов, состоящих из свободных майорановских фермионов. При этом вклад высших порядков теории возмущений для исходной задачи может быть учтён как квадратичное возмущение для этих фермионов. В качестве приложений рассмотрены следующие возмущения: магнитное поле, DM-взаимодействие через одного.

Литература

1. Kitaev A. U. Anyons in an exactly solved model and beyond // Annals of Physics. 2006. 321.2–111.

УДК 538.915

Расщепление куперовских пар в баллистических ферромагнитных СКВИДах

П.Л. Строганов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В работе рассматривается СКВИД, в котором в качестве джозефсоновских переходов выступают SFS-структуры с полуметаллическими ферромагнетиками. Так как куперовская пара не может пройти через такой переход (рассматривается синглетная сверхпроводимость), то весь транспорт заряда происходит через расщепление пар, когда два электрона идут по разным рукавам. Мы рассматриваем приближение одноканальных проводников и предел короткого контакта. При различных геометрических параметрах (длине рукавов и фазах, набираемых в тройниках) зависимость характеристик СКВИДа (андреевских уровней, ток-фазового соотношения и критического тока) от двух управляющих параметров (угла между намагниченностями и магнитным потоком) имеет качественно различный характер. Ток-фазовая характеристика может менять амплитуду и форму, а также менять знак (переходить в "пи-контакт") и иметь дополнительные пересечения нуля. Также зависимость критического тока от управляющих параметров может быть немонотонной. Периодичность по магнитному потоку удвоена по сравнению с обычным СКВИДом.

Литература

1. Stroganov P.L., Fominov Ya.V. arXiv: 1708.05089.

УДК: 538.955

Транспорт вдоль края 2D-топологического изолятора при наличии магнитной примеси

П.Д. Курилович

Московский физико-технический институт (государственный университет) Сколковский институт науки и технологий

Двумерные топологические изоляторы, впервые предложенные в [1], в последнее время вызывают большой интерес с теоретической и экспериментальной точки зрения. Особенностью таких систем является наличие одномерных краевых состояний, спин которых напрямую связан с импульсом (геликоидальные состояния). В пренебрежении взаимодействием между электронами такие краевые состояния обеспечивают идеальную проводимость вдоль края, устойчивую к присутствию немагнитных примесей и других возмущений, не разрушающих симметрию по отношению к обращению времени и не имеющих собственной динамики. Наличие магнитного беспорядка в образце может, однако, приводить к подавлению проводимости вдоль края.

В данной работе рассмотрены эффекты, связанные с рассеянием на магнитной примеси геликоидальных электронов на краю двумерного топологического изолятора. Вычислена поправка к проводимости, связанная с наличием магнитной примеси для произвольной матрицы обменного взаимодействия и произвольного спина примеси. Выяснено, что дифференциальный кондактанс как функция напряжения может иметь несколько экстремумов.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 15-52-06005) и президентского гранта для молодых докторов наук (грант № MD-5620.2016.2).

Литература

1. *Bernevig B.A., Hughes T.L., Zhang S.-C.* Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells // Science. 2006. V. 314. 1757.

УДК: 538.955

Транспорт вдоль геликоидального края в присутствии анизотропной магнитной примеси

В.Д. Курилович

Московский физико-технический институт (государственный университет) Сколковский институт науки и технологий

В последнее время большой экспериментальный и теоретический интерес прикован к двумерным топологическим изоляторам, наиболее известным представителем которых является квантовая яма CdTe/HgTe/CdTe с шириной d > 6,3 нм [1]. Одна из основных особенностей таких материалов – наличие бесщелевых состояний с дираковским спектром, локализованных на краю образца. Из-за сильной спин-орбитальной связи, проекция спина этих состояний на ось, перпендикулярную к плоскости топологического изолятора, однозначно связана с направлением их движения. В отсутствии возмущений, способных переворачивать спин, это приводит к идеальной одномерной баллистической проводимости вдоль края. В то же время магнитные примеси вызывают рассеяние электронов с переворотом спина и, как следствие, влияют на проводимость.

В этой работе мы изучаем влияние уединенной магнитной примеси типа Кондо на дифференциальный кондактанс вдоль края. При этом мы принимаем во внимание магнитную анизотропию, которая имеет место для примесей со спином $S > \frac{1}{2}$. Показано, что она оказывает сильное влияние на краевую проводимость в широком диапазоне температур и напряжений. Выяснено, что анизотропия, отличающаяся от одноосной, может

приводить к значимому рассеянию назад, даже если обмен между краевыми электронами и магнитной примесью изотропен.

Работа была выполнена при поддержке гранта Президента РФ для молодых докторов наук МД-5620.2016.2.

Литература

1. *Bernevig B. A., Hughes T. L., Zhang S.-C.* Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum // Science. 2006. V. 314. 1757.

УДК 538.945

Когерентный электронный транспорт в диффузионных контактах Al/InAsнанопроволока/Al

Л.В. Гинзбург, И.Е. Батов

Московский физико-технический институт (государственный университет) Институт физики твёрдого тела РАН

Когерентный электронный транспорт в субмикронных структурах на основе полупроводник/сверхпроводник привлекает существенный интерес как с переходов фундаментальной, так и прикладной точек зрения. Современные методы позволяют изготавливать планарные гибридные мезоскопические структуры сверхпроводник/полупроводник [1-3]. Недавно на основе полупроводниковых InAsнанопроволок с использованием сверхпроводящих Al электродов несколькими исследовательскими группами были изготовлены джозефсоновские структуры Al/InAsнанопроволока/А1 [4-6]. В ходе экспериментов выяснилось, что на поверхности InAsнанопроволок формируется зарядовый аккумуляционный слой. Благодаря этому слою в гибридной структуре оказалось возможным создать высокопрозрачные контакты между Al-электродами и полупроводниковой нанопроволокой.

B ланной работе экспериментально изучались недопированные InAsнанопроволоки с напылёнными методом электронно-лучевого испарения сверхпроводящими алюминиевыми контактами. Исследованы зависимости дифференциальной проводимости от напряжения смещения и затворного напряжения в управляемых эффектом поля джозефсоновских структурах Al/InAs-нанопроволока/Al (электронная плотность в InAs-нанопроволоке изменялась с помощью напряжения на затворе).

В дифференциальной проводимости наблюдаются особенности, связанные с многократным андреевским отражением в структурах. Был также обнаружен пик в дифференциальной проводимости при нулевом напряжении смещения. Амплитуда пика проводимости зависит от электронной плотности. Обнаруженный пик в дифференциальной проводимости исследуемых структур может быть объяснён в рамках модели «безотражательного туннелирования» наличием возвратных траекторий и многократных актов андреевского отражения на границе сверхпроводник/диффузный полупроводник [7, 8].

Авторы выражают благодарность Е.С. Тихонову, А.О. Денисосву и С.В. Петруше за помощь в проведении экспериментов, С.В. Егорову и А.В. Бубису за изготовление образцов, В.С. Храпаю за обсуждение результатов работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект N 17-02-00933.

- De Franceschi S. [et al.]. Hybrid superconductor-quantum dot devices // Nat. Nanotechnol. 2010 V. 5, 703.
- Schaepers Th. Superconductor/Semiconductor Junctions // Springer Tracts on Modern Physics. 2001. V. 174. Springer.

- 3. Sarma Das [et al.]. Majorana zero modes and topological quantum computation // npj Quantum Information. 2015. 1. 15001.
- 4. Nishio T. [et al.]. Supercurrent through InAs nanowires with highly transparent superconducting contacts // Nanotechnology. 2011. V. 22. 445701.
- 5. *Roddaro S.* [*et al.*]. Hot-electron effects in InAs nanowire Josephson junctions // Nano Research. 2011 V. 4. 259.
- 6. *Van Dam J.A.* [*et al.*]. Supercurrent Transport Through a High-Mobility Two-Dimensional Electron Gas // Nature. 2006. V. 442. 667.
- 7. Van Wees B.J. [et al.]. Excess conductance of superconductor-semiconductor interfaces due to phase conjugation between electrons and holes // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 69, 510.
- 8. *Popinciuc M.* [*et al.*]. Zero-bias conductance peak and Josephson effect in graphene-NbTiN junctions // Phys. Rev. B 2012. V. 85. 205404.

УДК 532.5.032

Формирование когерентных структур в двумерной турбулентности

А.В. Орлов

Институт физики твёрдого тела РАН Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН Московский физико-технический институт (государственный университет)

В эксперименте исследована эволюция квазидвумерной вихревой системы (движения в поперечном направлении подавлены за счёт того, что толщина слоя исследуемой жидкости существенно меньше продольных размеров ячейки L), возбуждаемой электромагнитным методом в тонком слое проводящей жидкости на масштабе накачки $l_f \ll L$. Наблюдается явление спектральной конденсации. В двумерной турбулентности существует два каскада (рис. 1): обратный (от волнового числа накачки $k_f \propto 1/l_f$ в сторону меньших k) с теоретически предсказанным законом $E(k) \propto k^{-5/3}$ и прямой с $E(k) \propto k^{-3}$ [1–3]. В бесконечной среде обратный каскад ограничивается масштабом вихря L_a , для которого трение о дно рассеивает всю энергию, передаваемую этому масштабу в обратном каскаде [1–3]. Однако, если среда ограничена (например границами ячейки, как в данном эксперименте), максимальный размер течения не может быть больше размера системы L. А если $L < L_a$ или даже $L \ll L_a$ (в данной работе реализуется этот случай: L = 10 см, $L_a \sim 100 \text{ см}$), тогда энергия, передаваемая в обратном каскаде, накапливается (формируется спектральная конденсация, рис. 1) на масштабе, близком к размерам системы L, и это приводит к формированию когерентных структур [4, 5].

Схема экспериментальной установки показана на рис. 2. Измерения проводились в ячейке (1) с размерами 10 см × 10 см × 1.5 см, изготовленной из органического стекла. Для уменьшения трения о дно квазидвумерная турбулентность генерировалась в двухслойной жидкости. На дно ячейки наливался 4,5 мм слой непроводящего перфтордекалина, на него - 8,5 мм слой более легкого 20% водного электролита на основе KNO₃ (2). Под дно ячейки была помещена решётка 10 × 10 из магнитов, расположенных в шахматном порядке по направлению поля, с периодом 1 см между центрами ближайших магнитов (3). Магниты создавали неоднородное поле, которое составляло ≈1 Тл вблизи их поверхности. Платиновые электроды (4), подключенные к источнику постоянного тока (подавалось 6,4 А), опускались в электролит. За счёт силы Лоренца на поверхности жидкости формировалась решетка вихрей с шахматной структурой по направлению их вращения (рис. 3). Для визуализации двумерных движений жидкости на поверхность электролита насыпался порошок полиамида со средним диаметром частиц ≈30 мкм. Частицы находились на поверхности в погруженном состоянии и полностью увлекались движениями жидкости. Чтобы детектировать частицы только в тонком слое вблизи поверхности, они подсвечивались лазерным листом (толщиной примерно 1-2 мм), полученным после прохождения через цилиндрическую линзу (5) луча лазера (6). Запись вихревых движений на поверхности производилась камерой Canon EOS 6D (7) со

скоростью 24 кадра в секунду. Чтобы проследить за треками частиц на поверхности, кадры накладывались друг на друга и усреднялись. Эволюция вихревых треков показана на рис. 4. На рис. 4b присутствует крупномасштабный когерентный вихрь, кроме него присутствуют флуктуации течения от мелкомасштабных вихрей. Чтобы от них избавиться, была отключена накачка, и из-за большого внутреннего трения за счёт вязкости они быстро затухли. На рис. 4c можно без существенных флуктуаций наблюдать когерентный вихрь через 13 секунд после отключения накачки.



Рис. 1. Спектр энергии двумерной турбулентности в ячейке с размерами $L \times L < L_{\alpha}$



Рис. 2. Схема экспериментальной установки: 1 – ячейка, 2 – жидкости, 3 – магниты, 4 – электроды, подключенные к источнику питания, 5 – цилиндрическая линза, 6 – лазер, 7 – камера



Рис. 3. а – Треки частиц полиамида, b – направления вращения вихрей после включения накачки



Рис. 4. Треки частиц полиамида на поверхности электролита через: а – минуту, b – 5 минут накачки, с – 13 секунд после отключения накачки

Литература

- Kraichnan R.H. Inertial ranges in two-dimensional turbulence // Phys. Fluids. 1967. V. 10, N 7. P. 1417–1423.
- Leith C.E. Diffusion Approximation for Two-Dimensional Turbulence // Phys. Fluids. 1968. V. 11. P. 671–673.
- 3. *Batchelor G.K.* Computation of the Energy Spectrum in Homogeneous Two-Dimensional Turbulence. Phys. Fluids. 1969. V. 12, supp. II. P. 233–239.
- 4. Sommeria J. Experimental study of the two-dimensional inverse energy cascade in a square box // J. Fluid Mech. 1986. V. 170. P. 139–168.
- Xia H. [et al.]. Turbulence-Condensate Interaction in Two Dimensions // Physical Review Letters. 2008. V. 101. P. 194504-1–194504-4

УДК 537.84

Эволюция магнитного поля в квазидвумерном случайном потоке

Л.Л. Огородников

Московский физико-технический институт (государственный университет) Сколковский институт науки и технологий

Турбулентное движение проводящей жидкости может приводить к самопроизвольной генерации достаточно больших магнитных полей, что составляет суть эффекта динамо [1]. Для трехмерного случайного потока было показано [2-4], что корреляционные моменты магнитного поля $< B^{2n} >$, $n = 1,2 \dots$ растут экспоненциально со временем.

Эволюция магнитного поля определяется изменением во времени линий тока в движущейся проводящей жидкости и диффузией магнитного поля за счет конечной проводимости:

$$\partial_t \vec{B} = (\vec{B}, \nabla) \vec{v} - (\vec{v}, \nabla) \vec{B} + \kappa \Delta \vec{B}$$
(1)

Эффект динамо в двумерных течениях (при этом поле считается имеющим все три компоненты) долгое время не изучался с того момента, как было показано [5-7], что на очень больших временах рост поля прекращается и начинается экспоненциальное убывание. Это находится в согласии с так называемой «теоремой анти-динамо» [5,6]. Утверждение подкрепляется точными математическими результатами [8,9], показывающими отсутствие неограниченного роста магнитного поля в двумерных потоках на ряде многообразий. Однако эти результаты не дают никакой информации о факторах, ограничивающих рост поля.

Эволюция мелкомасштабных флуктуаций магнитного поля была определена на больших временах в чисто двумерном случайном потоке [10], когда поле скоростей имело только две ненулевые компоненты и зависело только от координат в горизонтальной плоскости. В [10] были найдены более точные асимптотики на больших временах по сравнению с известными ранее работами [1,11,12].

В данной работе изучается поведение магнитного поля на больших временах в квазидвумерном случайном потоке. Рассматривается случай бесконечного пространства, заполненного проводящей жидкостью. Поле скоростей здесь предполагается случайным и квазидвумерным, т.е. оно имеет нулевую вертикальную составляющую, но две остальные компоненты зависят от z.

В работе сначала рассматривается линейная модель, в рамках которой скорость предполагается линейной по координате с конечной сдвиговой компонентой, не зависящей от z. Однако эта модель не учитывает конечный корреляционный радиус поля скорости в случайном потоке. Поэтому более точный результат дает модель Крэйчнана-Казанцева [3,13], учитывающая конечный корреляционный радиус, но полагающая флуктуации короткоживущими:

$$\langle v_{\alpha}(\vec{r},t)v_{\beta}(\vec{r}',t')\rangle = C_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}')\delta(t-t')$$
⁽²⁾

Даже в упрощенной линейной модели отличия квазидвумерного случая от двумерного становятся заметными.

- 1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика Т.VIII Электродинамика сплошных сред М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. 656с.
- A.A. Schekochihin, S.C. Cowley, S.F. Taylor, L. Maron, J.C. McWilliams Simulations of the small-scale turbulent dynamo // Astrophys. J. 612 (2004) 276–307.
- 3. *A.P. Kazantsev* Enhancement of a magnetic field by a conducting fluid // Sov. Phys. JETP 26 (1968) 1031.
- M. Chertkov, G. Falkovich, I. Kolokolov, M. Vergassola Small-scale turbulent dynamo // Phys. Rev. Lett. 83 (1999) 4065–4068.
- 5. *Ya.B. Zeldovich* The magnetic field in the two-dimensional motion of a conducting turbulent fluid // Zh. Èksp. Teor. Fiz. 31 (1956) 154, Sov. Phys. JETP 4 (1957) 460.
- 6. *B. Zeldovich Ya, A.A. Ruzmaikin* Magnetic field of a conducting fluid in two-dimensional motion // Zh. Èksp. Teor. Fiz. 78 (1980) 980, Sov. Phys. JETP 51 (1980) 493.
- 7. Ya.B. Zeldovich, A.A. Ruzmaikin, S.A. Molchanov, D.D. Sokolov Kinematic dynamo problem in a linear velocity field // J. Fluid Mech. 144 (1) (1984).
- 8. Oseledets V. Geophys. Astrophys // Fluid Dyn. 73 133, 1993.
- 9. Arnold V.I. and Khesin B.A. Topological Methods in Hydrodynamics (New York: Springer), 1998.
- 10. Kolokolov I.V. Evolution of magnetic field fluctuations in two-dimensional chaotic flow, J. Phys. A. 50 (2017) 155501.
- 11. Zeldovich Y.B., Ruzmaikin A.A. and Sokolov D.D. The Almighty Chance (Singapore: World Scientific), 1990.
- 12. Childress S. and Gilbert A. Stretch, Twist, Fold: the Fast Dynamo (Berlin: Springer), 1995.
- 13. Kraichnan R. and Nagarajan S. 1967 Phys. Fluids 10 859.

Секция физики низких температур

УДК 537.622.5

Влияние электрического поля на антиферромагнитный резонанс в мультиферроике CuCrO₂

С.К. Готовко^{1,2}, Л.Е. Свистов¹

¹ Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН ² Московский физико-технический институт (государственный университет)

CuCrO₂ является одним из примеров казидвумерных антиферромагнетиков (S = 3/2) с треугольной кристаллической решёткой. Эксперименты по нейтронному рассеянию показали, что при температуре ниже температуры перехода в кристалле устанавливается трёхмерный компланарный магнитный порядок с волновым вектором $q_{ic} = (0,329, 0,329, 0)$. Исследования образца методами антиферромагнитного резонанса (АФМР), ядерного магнитного резонанса и дифракции нейтронов показали, что в образце реализуется спиральная структура в плоскости, перпендикулярной одной из сторон треугольника. Проекции спиновой плоскости на плоскость треугольной структуры для трех возможных магнитных доменов показана на вставке к рис. 1. Переход в магнитоупорядоченное состояние сопровождается возникновением спонтанной электрической поляризацией Р, перпендикулярной спиновой плоскости [1]. Согласно [2], основные магнитные и электрические свойства CuCrO₂ объясняются в рамках теории магнитных фазовых переходов Дзялошинского-Ландау. Теория позволяет определить собственные частоты колебаний спиновой плоскости (частоты АФМР). Собственные частоты колебаний зависят не только от приложенного внешнего постоянного магнитного поля *H*, но также и от приложенного внешнего электрического поля Е. Внешнее электрическое поле приводит к сдвигу собственных частот колебаний и, соответственно, к сдвигу резонансного поля H_{res} при измерении на постоянной частоте. В работе исследовано влияние электрического поля на частоту АФМР в кристаллах CuCrO2. Так как сдвиг кривых поглощения мал, то в работе использовался модуляционный метод.

Помимо постоянных H и E к образцу прикладывалось переменное электрическое поле E~ на частоте ~300 Гц. Взаимная ориентация приложенных полей и поляризации по отношению к кристаллографическим осям указана на вставке к рис. 1. В эксперименте изучалась прошедшая через резонатор сверхвысокочастотная (СВЧ) мощность и амплитуда осцилляций СВЧ-мощности на частоте переменного электрического поля. Экспериментальные зависимости, полученные при T = 4,2 К и частоте резонатора v = 38,6 ГГц приведены на рис. 1, 2.

Отклик, записанный с помощью синхронного усилителя (зависимость на рис. 2), имеет вид производной резонансной кривой. Прошедшая через резонатор СВЧ-мощность и ее осциллирующая часть измерены в произвольных, но общих единицах. При смене знака постоянного электрического поля происходит смена электрической поляризации образца и, соответственно, фазы осциллирующего отклика (серая и пунктирная кривые). Измеренные зависимости, представленные на рис. 1 и 2; знание спектров частотно-полевых зависимостей АФМР и величины спонтанной электрической поляризации позволяют сравнить величины сдвига частот в электрическом поле с теоретическим сдвигом.

Ожидаемая кривая осциллирующей части проходящей СВЧ-мощности, полученная дифференцированием линии поглощения, умноженной на коэффициент, полученный в рамках теории [2], показана на рис. 2 (чёрная кривая). Видно удовлетворительное согласие.



Рис. 1. Линии поглощения от трёх магнитных доменов. На вставке – взаимная ориентация



Рис. 2. Отклики проходящей мощности на *E*~ (серая и чёрная пунктирная кривые соответствуют противоположным направлениям электрической поляризации в образце). Ожидаемый отклик,

Литература

- 1. *Kimura K., Nakamura H., Kimura S., Hagiwara M., Kimura T.* Tuning Ferroelectric Polarization Reversal by Electric and Magnetic Fields in CuCrO₂// Phys. Rev. Lett. 2009. V. 103. 107201.
- 2. Marchenko V.I. On Antiferromagnetic Transition in CuCrO2 // JETP. 2014. V. 119. P. 1084.

УДК 53.082.6

Исследование времени отклика приемника с СИНИС-болометром на частоте 350 ГГц

С.А. Лемзяков^{1,2}, М.А. Тарасов^{3,4}, В.С. Эдельман¹

¹Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН ²Московский физико-технический институт (государственный университет) ³Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН ⁴Chalmers University of Technology, Department of Microtechnology and Nanoscience

При температуре 100 мК была измерена постоянная времени отклика приемника излучения 350 ГГц на основе туннельной структуры сверхпроводник-изолятор-

нормальный металл-изолятор-сверхпроводник (СИНИС-структуры), интегрированной в плоскостную логопериодическую антенну [1].

Переходные характеристики приемников регистрировались при облучении тепловым излучением, нарастающим за времена порядка микросекунд. Источник был изготовлен из пластины лейкосапфира толщиной 0,34 мм с нанесенной тонкой пленкой нихрома. Излучатель был подвешен на манганиновых проводах, которые обеспечивали токоподвод к пленке и теплоизоляцию пластины от медного экрана с температурой 0,5 К криостата растворения. Через пленку пропускались прямоугольные импульсы тока нагрева микросекундной длительности, благодаря которым излучатель нагревался до температур в несколько градусов. Тепловое излучение пленки, пройдя через диафрагму, закрытую двумя интерференционными фильтрами с центральной частотой 350 ГГц и полосой пропускания сборки 70 ГГц, попадало на сферическую линзу, которая фокусировала излучение на болометре.

На рис. 1 представлен измеренный отклик по напряжению на импульс длительностью 2 мкс с мощностью $0,75 \text{ Bt/cm}^2$, что соответствует переданной излучателю энергии 3,6 мкДж. Установившаяся температура излучателя после импульса равна 4,7 К, при этом мощность излучения, падающего на болометр, практически постоянна на временах порядка 100 мс и равна 0,3 пВт. Экспоненциальный рост отклика после окончания импульса нагрева, наблюдаемый на рис. 1 и равный $2,4 \pm 0,2$ мкс, определяется суммарной задержкой вносимой емкостью измерительной линии, временем срабатывания предусилителя и собственной постоянной времени болометра. Отдельно с помощью оптронной пары были проведены при комнатной температуре измерения суммарной постоянной времени линии и предусилителя с сопротивлением на входе, равным дифференциальному сопротивлению болометра в рабочей точке. Полученная в результате постоянная времени равна 1,8–1,9 мкс. Из этих измерений, с учетом погрешности, получаем оценку собственного времени отклика болометра на высокочастотное излучение около 1 мкс.

Измерение времени отклика СИНИС-болометров является важным для понимания практических возможностей их использования. Согласно оценкам, сделанным на основе известных параметров электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействия для меди [2] времена отклика на излучение должны быть около 10–100 нс. Проведенные измерения дают результат около 1 мкс, что при этом согласуется с ранее полученным значением времени отклика СИНИС-болометра на изменение напряжения на структуре [3]. Это говорит о необходимости продолжить дальнейшее экспериментальное изучение процессов отклика СИНИС-болометров на высокочастотное излучение.



Рис. 1. Отклик болометра (темно-серая кривая) на излучение источника, нагреваемого импульсом длительностью 2 мкс и амплитудой 40 В (светло-серая кривая). Мощность нагрева 0,75 Вт/см², подведенная энергия 3,6 мкДж. Черным штрихпункиром показана экспонента с показателем $\tau = 2,4$ мкс. Ток смещения 3 нА, дифференциальное сопротивление болометра 14 кОм

Литература

- Tarasov M.A., Edelman V.S., Mahashabde S., Kuzmin L.K. Nonthermal Optical Response of Superconductor–Insulator–Normal Metal–Insulator–Superconductor Tunnel Structures // JETP. 2014. V. 146. P. 123.
- 2. *Tarasov M.A.* [*et al.*]. Electrical and optical properties of a bolometer with a suspended absorber and tunneling-current thermometers // Applied Physics Letters. 2017. V. 110. N 24. P. 242601.
- 3. Schmidt D.R. [et al.]. A superconductor-insulator-normal metal bolometer with microwave readout suitable for large-format arrays // Appl. Phys. Lett. 2005. V. 86. N 5. P. 053505.

УДК 536.48

Об аномальном поведении сопротивления алюминиевого провода вблизи критической температуры сверхпроводящего перехода

Г.А. Пензяков¹, Т.Е. Голикова¹, Д.С. Львов¹, И.С. Рожков², Н.В. Сурьянинова², А.А. Марунченко², С.В. Егоров², В.В. Рязанов^{1,2}

¹Институт физики твердого тела РАН

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

В работе [1] впервые был поднят вопрос о необычном поведении зависимости сопротивления «короткого» одномерного ($d_{\text{wire}} \leq \xi_{\text{Al}}$) сверхпроводящего провода вблизи температуры сверхпроводящего перехода. Так же было отмечено, что имеющиеся на тот момент теоретические модели не в силах количественно описать данный эффект. Теоретические предпосылки о природе данного пика (рис. 1) связаны с неоднородностью параметра порядка в геометрии четырехточечной схемы измерения. Вблизи T_C подвергающийся измерениям одномерный провод еще нормален, в то время как в узлах 4-х

точки в месте контакта потенциальных электродов параметр порядка уже равен единице. Тем самым, мы можем рассматривать короткий одномерный провод вблизи T_C как слабую связь на масштабе длины когерентности сверхпроводника, содержащую нормальный металл (N) и сверхпроводник (S).

Имеет большое значение верификация данного эффекта, а также его возможного описания с помощью теории Гинзбурга–Ландау [2], посредством смены сверхпроводящих потенциальных зондов нормальными. В связи с чем авторами данной работы были созданы четырехточечные структуры с помощью двухэтапной электронной литографии с совмещением. Были проведены экспериментальные исследования поведения сопротивления алюминиевого провода разных длин, вплоть до $2 \cdot \lambda_Q$, с потенциальными электродами из сверхпроводника и нормального металла (рис. 2а – алюминиевые, рис. 2б – платиновые).

В результате был подтвержден вклад квазичастичных возбуждений при измерениях сверхпроводящими потенциальными электродами на длинах вплоть до $2 \cdot \lambda_{\alpha}$.



Рис. 1. Характерная зависимость R–T для алюминиевого провода длиной $L_{\rm Al}$ = 3 μ m и толщиной



Рис. 2. Слева – четырехточечная схема для одной из измеряемой структур с (S) – потенциальными электродами($L_{41} = 1 \ \mu m$); справа – четырехточечная схема с (N) – потенциальными электродами.

Работа частично поддержана грантом РФФИ N 17-02-00933.

- 1. Santhanam P., Chi C. C., Wind S.J., Brady M.J., Bucchignano J.J. Resistnce Anomaly near the Superconducting Transition Temperature in Short Aluminium Wires // Phys. Rev. L. 1991. V. 66. N 17.
- 2. *Fink H.J., Grunfeld V.* Critical current of thin superconducting wire with side branches // Phys. Rev. B. 1985. 31. 600.

Влияние прослойки Cr на структурные и магнитные свойства слоистых структур Fe/Cr/Gd

А.Б. Дровосеков¹, Н.М. Крейнес¹, А.О. Савицкий^{1,2}, Д.И. Холин¹, Е.А. Кравцов³, *М.В. Рябухина*³

> ¹Институт физических проблем им. П.Л.Капицы РАН ²Институт физики твердого тела РАН ³Институт физики металлов УрО РАН

Магнитные слоистые структуры являются объектом интенсивного исследования в течение последних десятилетий как по причинам фундаментального, так и прикладного характера. Структура Fe/Gd является хорошо изученной системой и представляет из себя искусственный ферримагнетик [1]. Антиферромагнитное взаимодействие на границе между Fe и Gd и существенно различные температуры Кюри слоев Fe и Gd приводят к существованию богатой фазовой диаграммы. Структура Fe/Cr/Gd была предложена в работе [2] для изготовления магнитной пленки, обладающей большим магнитным моментом и высокой температурой Кюри.

В данной работе проводится сравнительное исследование структурных и магнитных свойств сверхрешеток [Fe(35 Å)/Cr(t)/Gd(50 Å)/Cr(t)]₁₂ без прослоек Cr (t = 0) и с тонкими прослойками Cr (t = 4 Å). Образцы были получены методом магнетронного напыления на стеклянной подложке. Структурные исследования были выполнены методом рентгеновской дифракции. Магнитные свойства изучались в температурном диапазоне 4.2 – 300 К методами СКВИД магнитометрии и ферромагнитного резонанса (ФМР) в частотном диапазоне 7 – 35 ГГц.

На рис.1 приведены данные рентгеновской дифракции для образцов без прослойки Сг и с прослойкой t = 4 Å. Эти данные свидетельствуют о формировании поликристаллических слоев Gd и аморфных слоев Fe в исследуемых образцах. Для образца без прослойки Cr наблюдается формирование гексагональной плотноупакованной кристаллической фазы (ГПУ) в слоях Gd. При введении прослойки Cr на дифрактограмме появляется дополнительный пик, соответствующий кубической гранецентрированной кристаллической фазе (ГЦК).

На рис.2 представлены кривые намагничивания М(Н) при разных температурах для двух образцов. Экспериментальные данные анализировались с использованием модели среднего поля, описанной в [3]. Ранее в рамках этой модели для сверхрешетки Fe/Gd были определены значения намагниченностей насыщения слоев Fe и Gd (M_{Fe}, M_{Gd}), межслойного обмена J, а также параметра кристаллической структуры слоев гадолиния $\zeta = z_1/z_0$, характеризующего отношение числа ближайших соседей атома Gd в плоскости атомного слоя (z_0) и в соседних атомных слоях (z_1), параллельных поверхности пленки. Полученные значения параметров приведены в таблице 1. Отметим, что для приемлемого описания магнитных свойств структуры Fe/Gd необходим учет температурной зависимости параметра среднего поля λ в слоях Gd (вставка на рис2а). В настоящей работе магнитные свойства образца Fe/Cr/Gd анализировались в модели среднего поля с использованием двух подходов. В 1-ом подходе предполагалось, что введение прослойки Сг приводит лишь к изменению межслойного взаимодействия Ј слоев Fe и Gd (таблица 1). На рис.2б пунктирными линиями представлены результаты расчетов кривых M(H) при таком подходе. Как видно из рисунка, он не позволяет получить хорошей аппроксимации экспериментальных данных. Для достижения лучшего согласия с экспериментом во 2-ом подходе в качестве подгоночных параметров, помимо межслойного взаимодействия, были добавлены намагниченность насыщения Fe и параметр ζ (таблица 1). Результаты аппроксимации кривых М(Н) при таком подходе показаны на рис.26 сплошными линиями.

В результате измерений ФМР были получены температурные зависимости резонансных полей при различных частотах для образца без прослойки Cr и образца с прослойкой Cr. Для обоих образцов на спектрах ФМР наблюдаются две линии поглощения, соответствующих различным модам колебаний намагниченности. Положение и ширина резонансных пиков существенно зависят от температуры в диапазоне 4 – 300 К. Полученные спектры демонстрируют хорошее согласие с расчетами в модели среднего поля с учетом релаксационного члена нелокального типа [3], что свидетельствует о применимости рассмотренного подхода для описания магнитных и магнитодинамических свойств сверхрешеток Fe/Gd и Fe/Cr/Gd.

Полученные результаты свидетельствуют о существенном влиянии тонкой $(t_{Cr}=4 \text{ Å})$ прослойки Cr на структурные и магнитные свойства слоистой системы Fe/Gd. Помимо сильного (более чем на порядок) уменьшения величины межслойного взаимодействия, наблюдается модификация магнитных характеристик слоев Fe и Gd, что связывается с их структурными изменениями. В частности, изменение величины параметра ζ косвенно свидетельствует об изменении кристаллической структуры слоев Gd, что подтверждает выводы рентгеновских исследований, указывающих на появление ГЦК фазы. Увеличение намагниченности насыщения слоев Fe может свидетельствовать о формировании в них кристаллитов ОЦК структуры.

	Fe/Gd	Fe/Cr/Gd (1-й подх.)	Fe/Cr/Gd (2-й подх.)
$M_{Fe}, \Gamma c$	1270	1270	1350
M _{Gd} , Γc	1150	1150	1150
J, эрг/см ²	-39	-2.0	-2.5
ζ	0.33	0.33	0.25

Таблица 1. Параметры модели среднего поля.



Рис.1 Спектры рентгеновской дифракции для образца Fe/Gd (а) и Fe/Cr(4 Å)/Gd/Cr(4 Å) (b). Точки – эксперимент, линии – аппроксимация.



Рис. 2 Кривые намагничивания для образца без прослойки (а) и с прослойкой Cr (b) при температурах 30К, 140К, 295К. На вставке к рис. (а) представлена температурная зависимость параметра среднего поля Gd. На вставке к рис. (b) показаны температурные зависимости намагниченности при различных значениях магнитного поля. Точки – эксперимент, линии – аппроксимация.

- 1. *Camley R E* 2015 Thermal properties of magnetic multilayers and nanostructures: applications to static and dynamic behavior Magnetism of Surfaces, Interfaces, and Nanoscale Materials (Handbook of Surface Science vol 5) (Amsterdam: North-Holland) Chapter 6
- 2. Sanyal B.et al.// Phys. Rev. Lett. 104, 156402 (2010)
- 3. Drovosekov A.B. et al. // J. Phys.: Condens. Matter 29, 115802 (2017)

Секция моделирования кинетических и ядерных процессов

УДК 519.876.5

Моделирование и исследование ударных волн в микроканалах на основе газокинетической теории Больцмана

Д.В. Замиусская¹, А.А. Бабайлов¹, И.В. Говорун², В.Г. Жотиков¹, З.П. Осипова², Е.Л. Остапов², А.В. Басалаев²

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет) ² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В данной работе изучаются и моделируются процессы формирования и распространения ударных волн в микроканалах. Явления, связанные с ударными волнами, встречаются не только в сплошных средах, но и в разреженных газах, для которых протекание процессов сильно зависит от числа Кнудсена. Характерная граница уверенной применимости уравнений сплошной среды для таких ситуаций соответствует значению числа Кнудсена 0,01, а превышение этого значения делает необходимым использование аппарата кинетической теории для решения задач численного моделирования, которые представляют большой интерес для практического применения. Так, например, была предсказана возможность генерирования молекулярных пучков высокой энергии, которая контролировалась бы начальным отношением давлений в толкающей и измерительной секциях ударной трубы [1].

Моделируемая ударная труба является геометрически однородной и представляет собой плоский (двумерный) канал, длина которого существенно превышает ширину. В начальный момент времени ударная труба разделена непроницаемой перегородкой на два отсека, условно названных толкающей и измерительной секциями (рис. 1). Обе секции заполнены одинаковым газом – аргоном. Такой выбор газа обусловлен тем, что аргон часто используется в реальных экспериментах с ударными волнами вследствие своей сравнительной дешевизны и нейтральности. Давление газа в толкающей секции в начальный момент времени в 10 раз больше, чем в измерительной секции, температуры одинаковы по обе стороны от непроницаемой перегородки.

Распад начального разрыва давления при резком удалении перегородки создает ударную волну, которая движется внутри измерительной секции. В работе рассматриваются двумерное плоское течение, что соответствует течению в щели, и два типа граничных условий: диффузное и зеркальное отражение.

Расчет процессов формирования и распространения ударной волны производится на основе решения кинетического уравнения Больцмана, определяющего временную эволюцию функции распределения газа [2]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} = I(\vec{\xi}, \vec{x}, t).$$
⁽¹⁾

Для описания пространственной геометрии задачи используется прямоугольная равномерная сетка. Параметры газа вычисляются при помощи численного интегрирования по скоростной векторной переменной $\vec{\xi} = \frac{\vec{p}}{m}$ молекулярной функции распределения $f(\vec{\xi}, \vec{x}, t)$, которая находится из конечно-разностного решения кинетического уравнения Больцмана (1).

Пространственный перенос (левая часть уравнения Больцмана) рассчитывается с помощью TVD-схемы с диффузными граничными условиями на стенках секций, интеграл столкновений рассчитывается консервативным проекционным методом для молекулярной модели жестких сфер [3], формула для которого имеет вид

$$I(\vec{\xi}, \vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{b_{\max}} (f'f_1' - ff_1)gb \cdot dbd\varepsilon d\vec{\xi}.$$

В процессе выполнения данной работы был создан программный аппарат, позволяющий моделировать течение ударных волн в микроканалах для тех значений чисел Кнудсена, для которых применение гидродинамического описания задачи не является корректным. Моделирование позволяет наблюдать процессы формирования, распространения, отражения от торцов канала и затухания ударной волны для различных размеров ударной трубы и типов граничных условий, а также определять положение фронта ударной волны в рассматриваемый момент времени. Разработанный комплекс программных средств дает возможность для получения локальных значений всех термодинамических величин, описывающих систему, а также позволяет визуализировать выходные данные в различных форматах, наиболее удобных для дальнейшего изучения.



Рис. 1. Схематическое изображение ударной трубы

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», http://ckp.nrcki.ru/ при поддержке РФФИ (17-08-00606, 16-08-00308, 17-08-00443, 17-08-00152, 17-08-00213, 15-08-01142).

Литература

- Nobuya Miyoshi [et al.]. Development of Ultra Small Shock Tube for High Energy Molecular Beam Source // 26th Int. Symposium on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conference Proceedings 1084. 2009. P. 557–562.
- Аникин Ю.А. Введение в основы разностных методов на примере уравнения газовой адвекции. М., 2007. 47 с.
- 3. *Черемисин Ф.Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. 1997. Т. 357. 1. С. 53–56.
- 4. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
- 5. *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов: под ред. акад. Н.Н. Боголюбова. М.: ИЛ, 1960.

УДК 533.722

Солвер для решения уравнения Больцмана в дискретизованном пространстве

М.М. Гаспарян^{1,2}, Ю.Ю. Клосс^{1,2}, Ф.Г. Черемисин^{1,3}, Е.П. Дербакова^{1,2}, М.В. Калинин¹, А.А. Захаров², Д.О. Михайлов²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» ³ФИЦ «Информатика и управление» РАН

В работе рассматривается структура солвера для решения уравнения Больцмана на неструктурированной сетке [1] и схема его работы:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} = \int_{0}^{\pi 2\pi} \int_{\Omega} (f'f'_1 - ff_1) g\sigma \sin \chi d\chi d\varepsilon d\vec{p} \,.$$

Также затрагивается тема устройства вспомогательной программы для обработки сгенерированной пространственной сетки. Для показа работы программы в пример приводится установка, состоящая из многотрубочных насосов Кнудсена. В результате действия эффекта Кнудсена показано, что газ начинает постепенно перетекать из одного резервуара в другой [2].

Для генерации пространственной сетки используется программный пакет GMSH [3]. Программа поддерживает четыре вида фигур: тетраэдры, призмы, пирамиды, гексаэдры.

GMSH позволяет оптимизировать построенную им сетку с помощью внутренних подпрограмм, в результате чего в сетке используются ячейки с большим «качеством», что позволяет выбирать больший шаг по времени для численной схемы.

Помимо этого, GMSH позволяет разбить пространственную сетку на части. Каждую отдельную часть в солвере будет выполнять отдельный процесс. GMSH использует специальные алгоритмы для минимизации площади соприкосновения процессов, что уменьшает количество необходимой информации, которую надо передать от одного процесса к другому, и, как следствие, уменьшает время работы программы.

Солвер может выполнять вычисления как на одном ядре, что удобно при отладке программы, так и на нескольких ядрах, что используется при исполнении громоздких расчетов. Выполнение кода сразу в нескольких потоках реализовано с помощью технологии MPI (Message Passing Interface) [4]. В нашей программе используется подход SPMD (Single Process, Multiple Data), который означает выполнение одного и того же кода на всех параллельных процессах. Передача функции распределения между двумя соседними процессами осуществляется через специальное граничное условие, внутри которого реализована передача сообщений с помощью MPI.

Описание геометрии устройства задается в .geo файле. GMSH считывает этот файл, а затем уже строит с его помощью неструктурированную сетку. Полученную сетку GMSH сохраняет в собственном формате .msh, в котором записываются все грани на поверхностях устройства, все ячейки с их точками. Однако GMSH не сохраняет грани между ячейками, что необходимо для моделирования любого уравнения на построенной пространственной сетке. Для исправления этого недостатка была написана программа, находящая по .msh файлу все грани между ячейками и сохраняющая их в свой формат (похожий на .msh). Создание файла, в котором описаны все точки системы, ячейки и грани между ячейками, позволяет один раз запустить анализатор .msh файла для одной неструктурированной сетки, а затем уже запускать на этой сетке солвер с различным количеством временных шагов или различными начальными условиями, различным количеством газов в системе, а также с различными параметрами газов.

Важной частью моделирования кинетического уравнения Больцмана на неструктурированной пространственной сетке является решатель (солвер). Солвер органирован с помощью объектно-ориентированного подхода таким образом, чтобы в него можно было легко добавить дополнительную фигуру, которая будет иметь другую геометрию, или добавить новое граничное условие.

Для тестирования работы программы была создана пространственная сетка для мембраны из многотрубочных насосов Кнудсена. Одна ячейка мембраны состоит из 18 трубок, входящих в одну широкую трубку. Моделирование при различных числах Кнудсена достигается путем геометрического растяжения всей установки. Моделирование целой бесконечной мембраны из насосов достигается путем постановки зеркальных граничных условий на одной четверти многотрубочного насоса. На поверхности узких трубок температура линейно возрастает от T_1 до $T_2 > T_1$, а вдоль широкой трубки падает до T_1 . Эффект теплового скольжения вдоль узких трубок приводит к откачке газа из левого резервуара в правый (рис. 2).



Рис. 1. Пространственная сетка установки (горячие участки обозначены темным цветом)



Рис. 2. (а) Зависимость откачки от числа Кнудсена, (б) отношение давлений в резервуарах в зависимости от времени (для Kn 0.62)

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», http://ckp.nrcki.ru/ при поддержке РФФИ (16-08-00072, 17-08-00252, 15-07-01618, 15-07-02025, 16-08-00184).

Литература

- 1. *Черемисин Ф*. *Г*. Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // ЖВМ и МФ. 2006. Т. 46. № 2. С. 329–343.
- 2. *Takata S., Umetsu H.* Numerical study on effective configurations of the knudsen pump for separation and compression // AIP Conference Proceedings. 2011. V. 1333. N 1. P. 998–1003.
- 3. GMSH. [Электронный pecypc]: geuz.org/gmsh/
- Дербакова Е.П., Клосс Ю.Ю., Хохлов Н.И., Федотов В.Ю., Шурыгин Б.А. Параллельные алгоритмы численных схем решения уравнения Больцмана на основе технологии MPI // Исследовано в России. 2007. С. 581–588.

УДК 519.876.5

Разработка программных солверов для решения кинетического уравнения в задачах переноса

М.К. Кравец^{1, 2}, В.В. Рябченков^{1, 2}, М.Ю. Сметанин¹, М.Б. Федорова², В.Г. Гришина², А.П. Потапов², О.И. Додулад²

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет) ² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В данной работе изучаются и моделируются процессы переноса тепла в двумерном сосуде со стенками некоторой температуры и пластинкой внутри. Стенки сосуда нагреты равномерно и однородно, их температура равна T_1 . Температура левой стороны пластинки

также равна T_1 , а правой – $T_2 > T_1$. Газ в ящике считается разреженным, поэтому для него применимо кинетическое уравнение переноса. Данный случай считается бесстолкновительным, в правой части кинетического уравнения предполагается, что St = 0 [1].

Моделируемый сосуд является геометрически однородным и представляет собой плоский (двумерный) ящик с размерами стенок *a* и *b*, $a \sim b$. В начальный момент времени температура во всём сосуде равна температуре стенок, за исключением «горячей» стороны пластинки. Сосуд заполнен разреженным газом. Температура T_2 в расчётном случае считается $T_2 = 2 \cdot T_1$.

С началом временного отсчёта начинает устанавливаться тепловое равновесие. Схематическое распространение фронта волны изменения температуры приведено на рис. 1. Также на данном рисунке показано направление действия радиометрической силы. Радиометрический эффект – явление самопроизвольного движения неравномерно нагретых тел, помещённых в разреженных газах, в направлении от более нагретой стороны к менее нагретой [2].

Расчет процессов изменения температуры производится на основе решения кинетического уравнения Больцмана, определяющего временную эволюцию функции распределения газа [3]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} = 0. \tag{1}$$

Для описания пространственной геометрии задачи используется прямоугольная равномерная сетка. Пространственный перенос (левая часть уравнения Больцмана) рассчитывается с помощью схемы первого порядка с диффузными граничными условиями на стенках сосуда.

В процессе выполнения данной работы был создан программный аппарат, позволяющий моделировать течение газа в двумерном сосуде с произвольной геометрией. Разработанный комплекс программных средств дает возможность для получения локальных значений всех термодинамических величин, описывающих систему, а также позволяет визуализировать выходные данные в различных форматах, наиболее удобных для дальнейшего изучения.



Рис. 1. Волновой фронт изменения температуры. Направление радиометрической силы

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок

мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», http://ckp.nrcki.ru/ при поддержке РФФИ (15-08-01240, 17-08-00680, 17-07-00376, 16-08-00087, 16-08-00443).

Литература

- 1. *Аникин Ю.А*. Введение в основы разностных методов на примере уравнения газовой адвекции. М., 2007.
- 2. *Сивухин Д.В.* Общий курс физики. Т. II. Термодинамика и молекулярная физика. М.: Наука, 1975. 519 с.
- 3. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.

УДК 533.722

Моделирование свободномолекулярного течения газа через узкие каналы

А.Н. Оразбаев¹, Н.А. Зименков.², И.Е. Квасов¹, Д.В. Мартынов², Д.Ф. Цуриков², П.В. Шувалов¹, А.В. Сакмаров²

¹Московский физико-технический институт (государственный униерситет) ²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Течение разряженного газа через трубы является одной из важных прикладных задач динамики разряженного газа. Первые исследования в этой области были выполнены Кнудсеном, Смолуховским и Клаузингом в период 1910–1930 гг. [1].

В механике сплошной среды перетекание газа по соединяющему сосуды каналу приводит к установлению в них равенства давлений. Кнудсеном было показано экспериментально, что для свободномолекулярного течения через отверстие это условие не выполняется [2]. Свободно молекулярное течение через длинные каналы рассматривалось Смолуховским [3] и Клаузингом [4]. В предположении, что молекулы газа отражаются от стенок канала по закону косинусов, Клаузингом было выведено интегральное уравнение, описывающее такое течение [5]. Однако отражение по закону косинусов является неестественным. Использование общепринятого зеркально-диффузного отражения требует проведения численного моделирования.

Постановка задачи показана на рис. 1.

Два сосуда разделены короткой трубкой, ширина (2D) которой много меньше длины свободного пробега молекул в обоих сосудах. Длина трубки L. В каждом сосуде газ находится в равновесии при температурах T_1 и T_2 , ($T_1 = 2 \cdot T_2$) и концентрации n_1 и n_2 , ($n_2 = 2 \cdot n_1$). Давления в правом и левом сосудах в начальный момент равны.

Сосуды считаем большими, так что молекулы не изменяют состояния газа в сосудах, проникнув из одного сосуда в другой.

Течение определяется двумя безразмерными параметрами подобия, r = L/D и $s = T_2/T_1$, а также коэффициентом аккомодации α . Мы зафиксируем параметр s = 2 и рассмотрим влияние параметров r и α .

В начальный момент функция распределения по скоростям газа внутри системы имеет максвелловский вид при температуре T_j и числовой плотности молекул n_j в сосуде j (j = 1, 2), в трубке температура меняется линейно от T_1 до T_2 :

$$f(\xi_{x},\xi_{y},\xi_{z}) = n_{j} \sqrt{\left(\frac{m}{2\pi kT_{j}}\right)^{3} \exp\left(-\frac{m(\xi_{x}^{2}+\xi_{y}^{2}+\xi_{z}^{2})}{2kT_{j}}\right)},$$

где ξ_x, ξ_y, ξ_z – проекции скорости молекулы на координатные оси, m – масса молекулы газа, k – постоянная Больцмана.

Отражение молекул от стенок резервуаров и трубки является зеркально-диффузным с максвелловским распределением по скоростям диффузно отраженных молекул. Часть (1 – α) молекул отражается зеркально. Температура диффузно отраженных молекул равна температуре стенки. От плоскостей симметрии молекулы отражаются зеркально.

Расчеты производились на основе численных методов первого и второго порядков точности. Несмотря на то, что решается уравнение Больцмана с нулевым интегралом столкновений, расчет довольно трудоемкий, так как число узлов сетки в пространстве скоростей равно 10^4 . Таким образом, решается система из 10^4 гиперболических уравнений адвекции, связанных граничными условиями на стенках сосудов и трубки. Время расчета одного варианта на виртуальной машине с динамически выделенным диском 2GB и 8GB ОЗУ на четырех потоках составило около одного часа. Результаты расчета представлены на рис. 2–4. Расход нормирован на расход через отверстие (т. е. при чисто зеркальном отражении $\alpha = 0$).



Рис. 1. Схема задачи



Рис. 2. Зависимость расхода от числа шагов по времени для разных значений *r*



Рис. 3. Зависимость расхода в установившемся режиме от r при $\alpha = 1$



Рис. 4. Зависимость установившегося расхода от коэффициента аккомодации для разных значений *r*

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», http://ckp.nrcki.ru/ при поддержке РФФИ (17-07-00263, 15-08-02179, 16-08-00130, 16-07-00403, 15-08-01416, 15-07-01812).

- 1. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967, 440 с.
- 2. Knudsen M. // Ann. Physik. 1910. 31(4). 205.
- 3. *Smoluchowski M. Zur Kinetischen* Theorie der Transpiration und Diffusion Verdünnter Gase //Ann. der Physik. 1910. V. 33. 4 series. P. 1559–1570.
- Clausing P. Über die Strömung sehr verdünnter Gase durch Röhren von beliebiger Länge. // Ann. der Physik. 1932. V. 12. 5th series. P. 961–989. (The Journal of Vacuum Science and Technology. 1971. V. 8. N 5. P. 636–646.)
- 5. Clausing P. // Ann. d. Physik. 1932. 12. 5 rep.

Компьютерное моделирование газодинамических процессов в межэлектродном зазоре многоэлементного термоэмиссионного электрогенерирующего канала ЯЭУ

Д.В. Щербаков^{1,2}, Д.Ю. Любимов^{1,3}, И.Э. Калимуллин², С.Э Саркисов², А.В. Морозов², А.В. Лисенко⁴, О.К. Шайхатаров²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» ³ФГУП «НИИ НПО «ЛУЧ» ⁴ООО «ЛОКиП»

Среди возможных типов космических ядерных энергетических установок наибольшее развитие получили установки на основе ядерных реакторов со встроенными в активную зону термоэмиссионными реакторами-преобразователями. Одним из элементов реактора является многоэлементный ЭГК (электрогенерирующий канал), содержащий вентилируемый твэл с ядерным топливом на основе диоксида урана или других перспективных топливных материалов [1]. Для отработки и обоснования конструкции ЭГК проводятся его испытания в петлевом канале ядерного реактора [2].

Проблемной задачей в разработке ЭГК является оценка давлений и потоков газообразных продуктов деления, попадающих в МЭЗ (межэлектродный зазор) через систему газоотвода. Зазор представляет собой полость между цилиндрами, длина которой составляет 500 мм, а ширина 0,4 мм. Полость заполнена рабочим телом (Cs) при давлении 150 Па. Согласно расчетам, проведенным методом решения уравнения диффузии вдоль МЭЗ, давление Xe, Kr в полости МЭЗ составляет 10⁻³–10⁻⁴ Па [3]. Таким образом, для смеси характерны числа Кнудсена в диапазоне 0,2–100 ед. Для таких параметров газа возможно моделирование методом решения уравнения Больцмана [4]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{p_x}{m} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{p_y}{m} \frac{\partial f}{\partial y} = \int \left(ff_1 - ff_1 \right) gbdbd\varepsilon d\mathbf{p}_1.$$

Поскольку полость МЭЗ радиально симметрична, то для моделирования используется двумерный вид уравнения Больцмана, в котором x – направление вдоль зазора, y – поперек. Решение численного уравнения разбивается на два этапа: решение уравнения переноса и уравнения релаксации. Первое решается с использованием TVD-схемы, второе – с помощью проекционного метода [4]. Поскольку расчет производился с учетом β распада Xe, Kr, всего рассматривалось семь газов: Cs, Kr, Xe, Rb, Sr, Cs(138). Учет столкновений проводился для пар: Cs–Cs, Cs–Xe, Cs–Kr.

Для решения уравнения была разработана программа на языке C++. Программа может проводить расчеты для различных входных данных: тип сеток, геометрия задачи и набор газов. Выбранный метод решения уравнения позволяет производить расчет в нескольких параллельных потоках, в программе реализован параллельный расчет с использованием пакета MPI. Схема программы представлена на рис. 1.

В результате расчетов были получены значения давлений Xe, Kr в полости МЭЗ после установления термодинамического равновесия для двух конструктивных схем МЭЗ: А – с односторонним выводом продуктов деления, Б – с двусторонним (рис. 2).

Полученные результаты согласуются с ранее проведенными расчетами. Была обнаружена линейная зависимость увеличения давления компонентов в области коллектора при увеличении потока продуктов деления в МЭЗ. С увеличением степени прокачки цезия в схеме с двумя открытыми концами падает давление продуктов деления в области коллектора, и они выносятся потоком через правый конец МЭЗ. Было обнаружено, что в схеме с двумя открытыми концами давление продуктов деления в области коллектора ниже, чем в схеме с одним открытым концом.

Таким образом, метод численного решения уравнения Больцмана применим к моделированию газодинамики в полости МЭЗ.



Рис 1. Схема программных модулей



Рис 2. Давление в схеме А: a - Kr; $\delta - Xe$; в схеме Б: e - Kr; 2 - Xe

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», http://ckp.nrcki.ru/ при поддержке РФФИ (16-08-00270, 16-08-00101, 16-08-00153, 17-08-00963, 15-08-01728, 17-08-00339).

- 1. Алексеев С.В., Выбыванец В.И., Гонтарь А.С. [и др.]. Перспективные топливные материалы для термоэмиссионных ЯЭУ // Атомная энергия. 2013. Т. 115. Вып. 6. С. 322–331.
- 2. Синявский В.В. Методы и средства экспериментальных исследований и реакторных испытаний термоэмиссионных электрогенерирующих сборок. М.: Энергоатомиздат, 2000. 375 с.
- 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. 2011. Т. 110. Вып. 6. С. 321–327.
- 4. *Черемисин Ф.Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Докл. РАН. 1997. Т. 357. № 1. С. 53–56.

УДК 004.08

Генеративно-состязательные сети для симуляции ливней в калориметрах

Е.Г. Орлова

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Моделирование является важной частью анализа в ядерной физике и физике частиц. Сейчас процесс прохождения элементарных частиц через вещество в основном симулируется методами Монте-Карло, применение которых требует больших вычислительных ресурсов. Однако для обработки данных следующего поколения экспериментов на Большом адронном коллайдере даже имеющихся в распоряжении ЦЕРН весьма внушительных вычислительных ресурсов может не хватить. В связи с этим ученые ищут новые подходы к симуляции, и машинное обучение – один из них. Он обещает ускорить симуляцию, в частности симуляцию ливней в калориметрах, что является одним из самых вычислительно дорогих этапов в симуляции прохождения частиц через детектор.

Для данной задачи предлагается использовать генеративно-состязательные сети [1], впервые описанные Гудфеллоу в 2014 г., которые могут не только симулировать прохождение частицы через калориметр, но и учитывать дополнительную информацию, такую как тип частицы или энергия.

Рассмотрим основные идеи генеративно-состязательных сетей. Имеется две нейросети: первая, называемая генератором G, из вектора случайного шума пытается генерировать правдоподобные изображения; вторая, называемая дискриминатором D, классифицирует подаваемые на вход изображения на настоящие/поддельные. Таким образом, целью генератора G является повысить процент ошибок сети дискриминатора D, а целью сети D является, наоборот, улучшение точности распознавания, что можно рассматривать как минимакс задачу:

$$\min_{G} \max_{D} E_{x \sim p_{data}}[\log D(x)] + E_{z \sim p(z)} \left| \log \left(1 - D(G(z)) \right) \right|,$$

где $x \sim p_{data}$ — образцы из входных данных, $z \sim p(z)$ — случайный шум, G(z) — изображения, сгенерированные дискриминатором, D(x) — выход дискриминатора, определяющий вероятность того, что полученное изображение реально. Однако на практике эта формула используется редко. Чаще генератор обновляется так: максимизируется вероятность того, что дискриминатор сделает неправильный выбор. Это небольшое изменение помогает избавиться от проблем с градиентом *G*, уходящим в ноль, когда *D* уверен. Тогда формула становится следующей:

 $\max_{D} E_{x \sim p_{\text{data}}}[\log D(x)] + E_{p \sim p(z)} \left[\log \left(1 - D(z) \right) \right].$

На практике описанный метод прекрасно зарекомендовал себя для генерации правдоподобных изображений.

Наша идея применения генеративно-состязательных сетей для симуляции 3Dливней в детекторе заключается в следующем: можно рассматривать данные с калориметров как трехмерные тензоры с информацией об энергетическом ливне, тогда генератор G вместо генерации двумерных изображений должен генерировать трехмерные. Безусловно, в данном случае задача усложняется, так как нужно генерировать не просто ливни, а ливни определенных частиц с определенной энергией, то есть на вход генератору подается также информация о типе частицы и начальной энергии. Предоставленные данные отражали информацию ИЗ калориметра однородной гранулярности, рассматривались два типа частиц – электрон и протон, бьющие в центральную ячейку калориметра с энергией от 0 до 500 ГэВ.

Архитектура наших нейросетей представлена ниже: для дискриминатора на рис. 1, для генератора на рис. 2, где использовался так называемый conditional GAN [2] и Wasserstein GAN [3], чтобы избежать генерации идентичных изображений. Для реализации мы использовали фреймворк Keras и Neon, все программы запускались на ГПУ.

Полученные 3D-ливни представлены на рис. 3, продольные срезы и поперечные срезы ливня и сравнение результатов, сгенерированных нашей моделью и Geant4, представлены на рис.4 и 5.

В результате данного исследования нами была реализована модель генеративносостязательных сетей, результат работы которой соответствует ожидаемым распределениям и дает возможность обобщить описанный случай на более общий, например, калориметр с высокой гранулярностью.



Рис. 1. Архитектура дискриминатора



Рис. 2. Архитектура генератора



Рис. 3. Ливень



Рис. 4. Продольный срез


Рис. 5. Поперечный срез

Литература

- 1. *Goodfellow I.* [*et al.*]. Generative adversarial nets //Advances in neural information processing systems. 2014. P. 2672–2680.
- 2. Mirza M., Osindero S. Conditional generative adversarial nets //arXiv preprint arXiv:1411.1784. 2014.
- 3. Arjovsky M., Chintala S., Bottou L. Wasserstein gan //arXiv preprint arXiv:1701.07875. 2017.

Секция вычислительной физики конденсированного

состояния

УДК 538.931

Взаимодействие металлических частиц пыли с активным газом

А.Б. Мазитов

Московский физико-технический институт (государственный университет) Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова

Смоделировано поведение сферической частицы титана радиусом в 30 Å в плотном атомарном водороде при температуре 3000 К и давлении в 100 ГПа в статических (неподвижная сферическая частица в оболочке из водорода) и динамических (сферическая частица, движущаяся в водороде со скоростью $v = 1 \, {\rm KM}/{\rm c}$) условиях. Моделирование производилось с помощью метода молекулярной динамики (MD), реализованного в программном пакете LAMMPS [1].

Для проведения MD-расчетов был реализован новый многокомпонентный потенциал межатомного взаимодействия на основе машинного обучения [2]. В качестве базового метода построения потенциала взята линейная регрессия на основе метода функций симметрии [3, 4]. Для обучения потенциала использован набор траекторий смеси титана и водорода при условиях T = 3000 K, P = 100 ГПа, полученных с помощью прямых расчетов методом квантовой молекулярной динамики (QMD) [5–7]. Из них были определены энергии структур, а также силы, действующие на каждый атом [Янилкин, 2017].

Для описания процесса проникновения водорода в титан предложена диффузионная модель, для которой с использованием соотношения Эйнштейна–Гельфанда были вычислены коэффициенты диффузии, а также, построено аналитическое решение диффузионного уравнения (второй закон Фика). Результаты моделирования данного процесса для случая статической частицы показали хорошее соответствие с аналитическим решением (рис. 1), а полученные коэффициенты диффузии сравненимы с аналогичными QMD расчетами (табл. 1) [Дьячков, 2017]:

$$\frac{dR}{dt} \approx -\alpha(T,P) \cdot \frac{\delta}{\tau} = -\alpha \cdot \frac{\sqrt{D(T,P)\tau}}{\tau} = -\alpha(T,P) \cdot \sqrt{\frac{D(T,P)}{\tau}} = -\alpha(T,P) \cdot \sqrt{\frac{D(T,P)v}{2R}}.$$
 (1)

Для расчета с движущейся частицей была поставлена задача качественного описания кинетики ее распыления. Поскольку при моделировании наблюдался процесс диффузионного «разрыхления» поверхностного слоя атомами водорода с последующим его смешением с потоком, была предложена оценка скорости уменьшения радиуса частицы (1), где $\tau = 2R/v$ – характерное время движения атома водорода вдоль частицы, $\delta = \sqrt{D\tau}$ – характерная глубина проникновения водорода внутрь металла за время τ , α – безразмерный

коэффициент, зависящий в общем случае от температуры и давления. Решением уравнения (1) при условии нулевого изменения радиуса в момент t = 0 является функция (2)

$$R(t,T,P) = \left(-\frac{3}{2}\alpha(T,P)\cdot\sqrt{\frac{D(T,P)\nu}{2}}\cdot t\right)^{\frac{2}{3}}.$$
(2)

При предположении о том, что зависимость от *T*, *P* в уравнении зашита в коэффициенте диффузии, а $\alpha(T, P) = \alpha = \text{const} = \sqrt{6}$, функция R(t) была сравнена с характерным изменением радиуса частицы в MD расчете (рис. 2)

Результаты вычисления коэффициентов диффузии

	Ti	Н	Т, К	P, GPa
$D, \frac{cm^2}{s} [MD]$	$0.33 \cdot 10^{-4}$	$5.24 \cdot 10^{-4}$	3000	100
$D, \frac{cm^2}{s} [QMD]$	$0.48 \cdot 10^{-4}$	$4.5 \cdot 10^{-4}$	3000	100



Рис. 1. Сравнение характера проникновения водорода в частицу титана (столбцы гистограммы указывают на концентрацию атомов на заданном расстоянии от центра частицы) с аналитическим решением уравнения диффузии (сплошная кривая)

15 R, Å Таблица 1

R, Å



Рис. 2. Зависимости радиуса частицы от времени, вычисленные в эксперименте (точки) и полученные аналитически (сплошная кривая)

- Plimpton S.Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. P. 1–19.
- 2. Bishop C. Pattern recognition and machine learning // Springer. 2006.
- 3. *Behler J.* Constructing High-Dimensional Neural Network Potentials: A Tutorial Review // Int. J. Quantum Chem. 2015.
- Li Z., Kermode J.R., De Vita A. Molecular Dynamics with On-the-Fly Machine Learning of Quantum-Mechanical Forces // Phys. Rev. 2015. V. 114.
- Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Physical Review B. 1993. V. 47.1 P. 558.
- Kresse G., Fürthmuller J. Efficient Iterative Schemes for Ab Initio Total-Energy Calculations Using a Plane-Wave Basis Set // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169.
- Kresse G., Joubert D, From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 1758.

УДК 538.915

Сравнение моделей разогретого плотного водорода: волновые пакеты и теория функционала плотности

И.Д. Федоров, В.В. Стегайлов

Объединенный институт высоких температур РАН Московский физико-технический институт (государственный университет)

Задача разогретого плотного вещества ставится при изучении внутренностей планет гигантов, при ударном или лазерном нагреве твердых тел, которые переходят в плазму. Это сложное для теоретического описания состояние, потому что оно лежит между холодным веществом, хорошо описываемым квантовой механикой основного состояния, и разогретой материей хорошо описываемой классическими моделями плазмы. Реакции, диссоциации и ионизации могут возникать случайно, и эффекты, появляющиеся за счет возбужденных электронов, могут быть важны.

Метод волновых пакетов представляет собой задачу молекулярной динамики. В ней ядра представлены как точечные заряды с массой, а электроны рассматриваются как

пакеты (приближенные функцией Гаусса). Соответственно энергия взаимодействия ядер и электронов определяется как функция от позиций ядер и электронов, а также размеров электронов. Полная энергия приближенно задается как сумма кинетической энергии электронов, электростатической потенциальной энергией и энергией «запрета Паули».[1–3].

Теория функционала плотности оперирует электронной плотностью. Она зависит лишь от трех координат, что в отличие от метода Хартри–Фока и его производных, использующих многоэлектронную волновую функцию от 3N координат, дает большие скорости расчета. В рамках данного метода задача системы из взаимодействующих электронов сводится к системе независимых электронов в некотором эффективном потенциале. [4, 5].

В данной работе исследовался водород при давлениях в несколько ГПа и температурах порядка тысяч Кельвин. При моделировании использовались обе методики. Для метода волновых пакетов проводилось так же усреднение траекторий электронов, с целью извлечения электронной плотности. Результатом стало сравнение данных моделирования и физическое обоснование полученных результатов.

Литература.

- 1. Julius T. Su and William A. Goddard III Excited Electron Dynamics Modeling of Warm Dense Matter // Physical Review Letter. 2007.
- 2. Julius T. Su and William A. Goddard III The dynamics of highly excited electronic systems: Applications of the electron force field // J. Chem. Phys. 2009.
- 3. Knudson M.D., Desjarlais M.P., Becker A., Lemke R.W., Cochrane K.R., Savage M.E., Bliss D.E., Mattsson T.R., Redmer R. Direct observation of an abrupt insulator-to-metal transition in dense liquid deuterium // Science. 2015.
- 4. Parr R. G., Yang W. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules // New York: Oxford University Press. 1989.
- Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // Physical Review. 1965.

УДК 517.935:538.945

Численное исследование релаксационной динамики струны в поле нелинейной квазиупругой силы

С.В. Поляков¹, М.В. Федирко²

¹Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН ² Московский физико-технический институт (государственный университет)

Модель упругой струны используется для описания состояния и динамики абрикосовских вихрей в сверхпроводниках второго рода, в том числе высокотемпературных [1–4]. В развитие этой модели в настоящей работе проводится исследование динамики упругой нити в поле нелинейной квазиупругой силы.

Динамическая масса струны считалась пренебрежимо малой, поэтому рассматривалась релаксационная динамика струны при наличии силы вязкого трения. Распределение внешней вынуждающей силы вдоль длины струны предполагалось сильно неоднородным, сила считалась сосредоточенной вблизи краев струны. Исследовалась динамика ухода упругой струны из стационарного состояния в поле нелинейной силы притяжения [3]:

$$F(s) = -U_{p0}r_p^2 \frac{2s}{\left(r_p^2 + s^2\right)^2},$$

где s – расстояние до невозмущенного положения струны, U_{p0} – глубина потенциальной ямы, r_p – эффективный радиус действия силы. Силовое поле такого вида используется для

описания пиннинга вихрей на линейных дефектах [5–7]. В таком поле при достижении внешней вынуждающей силой некоторого критического значения происходит уход струны из стационарного состояния. Расчет стационарных состояний и критических значений внешней силы проводился в работах [3, 4].

Нами исследовалась динамика ухода струны из стационарного положения в зависимости от величины внешней вынуждающей силы и ее локализации. Соответствующая динамическая краевая задача решалась численно с использованием метода конечных разностей по пространству и времени. Схема по времени была полунеявной (нелинейность бралась с предыдущего слоя по времени) и решалась с помощью метода прогонки.

На основе разработанной методики была проведена серия вычислительных экспериментов. Полученные в них характерные зависимости скорости края и середины струны от времени представлены на рис. 1, характерные зависимости времени ухода края и середины струны от степени локализации внешней силы представлены на рис. 2. На рис. 3 показана зависимость времени ухода края и середины струны от величины импульса вынуждающей силы.

Как показывают результаты расчетов, характерное время ухода струны из связанного состояния определяется в основном задержкой её центральной части, а его зависимость от степени локализации внешней силы близка к линейной. Обсуждаются физические причины полученных зависимостей.

Результаты работы могут быть использованы при исследовании электродинамики сверхпроводников.



Рис. 1. Зависимость скорости края и середины струны от времени под воздействием импульса внешней силы (отн. ед.)



Рис. 2. Зависимость времени ухода края и середины струны от степени локализации внешней силы (отн. ед.)



Рис. 3. Зависимость времени ухода края и середины струны от величины импульса внешней силы (отн. ед.)

Работа поддержана грантом РФФИ № 17-01-00973-а.

Литература

- 1. *Brandt E.H.* Large range of validity of linear elasticity of the vortex lattice in high-T_c superconductors // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 69. N 7. P. 1105–1108.
- Tsvetkovskii V., Kasatkin A., Shabatura V. Mechanics of vortex escape from extended linear defect in 3D-aniso tropic superconductor // IOP J. Physics: Conf. Ser. 2006. V. 43. P. 639–642.
- 3. Федирко В.А., Касаткин А.Л., Поляков С.В. Критический ток депиннинга упругих вихревых нитей в сверхпроводниках с протяженными линейными дефектами // Физика металлов и металловедение. 2016. Т. 117. № 9. С. 895–900.
- 4. *Федирко В.А., Поляков С.В., Касаткин А.Л.* Исследование уравнения пиннинга абрикосовского вихря на линейном дефекте в пластине сверхпроводника // Математическое моделирование. 2014. Т. 26. № 1. С. 33–41.
- 5. Blatter G.M., Feigel'man M.V., Geshkenbein V.B., Larkin A.I., Vinokur V.M. Vortices in high-temperature superconductors // Rev. Mod. Phys. 1994. V. 66. N 4. P. 1125–1388.
- 6. Пашицкий Э.А., Вакарюк В.И. Пиннинг вихрей Абрикосова на дислокациях и критический ток в высокотемпературных сверхпроводниках // Физика низких температур. 2002. Т. 28. № 1. С. 16–23.
- Lopatin A.V., Vinokur V.M. Delocalization in Two-Dimensional Disordered Bose Systems and Depinning Transition in the Vortex State in Superconductors // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 92. N 6. P. 067008–067011.

УДК 537.611

Возбуждение спиновых волн в микроструктурах с мультидоменной конфигурацией

Д.А. Толмачев

Московский физико-технический институт (государственный университет) Helmholtz Zentrum Dresden Rossendorf Объединенный институт высоких температур РАН

Рассмотрена динамика возбуждения и распространения спиновых волн в доменных стенках для образца с анизотропией – железа. Моделирование динамики спиновых волн проводилось путем численного решения уравнений Ландау–Лифшица–Гильберта (1) с помощью программы MuMax 3:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = -|\gamma| \left[\mathbf{M} \times \mathbf{H}^{eff} \right] + \frac{\alpha}{M} \left[\mathbf{M} \times \frac{\partial M}{\partial t} \right]$$
(1)

Здесь М – плотность магнитного момента (намагниченность), H^{eff} – эффективное магнитное поле, α – параметр диссипации, γ – феноменологическая постоянная.

Доменная стенка – место, где изменяется направление намагничивания между двумя областями, может использоваться для контролируемого распространения спиновых волн. Здесь, в стенке, эффективное поле значительно меньше, чем в окружающих областях. Спиновые волны низкой частоты могут распространяться только вдоль стенки.

Эксперимент проводился на железе. Согласно эксперименту, в структуре стенок «Брильянт» при возбуждении спиновых волн антенной, расположенной так же, как на рис. 2, спиновые волны в соседних доменных стенках имеют различную интенсивность. Было предложено две причины для этого – неровное расположение антенны относительно стенки или то, что свойства стенки зависят от угла между ней и антенной. Антенна возбуждает поле, аналогичное прямоугольному проводу, при протекании по нему электрического тока.

Для исследования первого предположения изменялось положение антенны относительно доменной стенки (рис. 3) и сравнивался спектр, возбуждаемый в стенке при изменении тока по закону $\frac{\sin x}{x}$ после преобразования Фурье. Результаты изображены на рис. 4, на низких частотах не было замечено сильного изменения, что позволяет предположить, что это предположение не является причиной изменения интенсивности.

Для проверки второго предположения использовалась технология закрепления центральной воронки в смещенном положении, что позволяет изменить угол доменной стенки между соседними регионами. Однако доменные стенки начинают изменять свою форму, поэтому данная модель нуждается в доработке.



Рис. 1. Динамика магнитного момента, описываемая уравнением [1]



Рис. 2. Различие в интенсивности спиновых волн между соседними стенками



Рис. 3. Компьютерная модель



Рис. 4. Результат сравнения частот





Рис. 5. Различные модели для проверки второго предположения

- 1. Vansteenkiste A., <u>Leliaert J.</u>, <u>Dvornik M.</u>, <u>Helsen M.</u>, <u>Garcia-Sanchez F.</u>, and <u>Van Waeyenberge</u> B. The design and verification of mumax3 // AIP Advances. 2014. 4 107133.
- 2. *Gurevich A.G., Melkov G.A.* Magnetization Oscillations and Waves // Nauka, Moscow. 1994; CRC, Boca Raton, Fl. 1996.

УДК 538.913

Расчет константы диффузии межузельных атомов для ОЦК-металлов

К.С. Фиданян, В.В. Стегайлов

Московский физико-технический институт (государственный университет) Объединенный институт высоких температур РАН

Диффузия точечных дефектов в кристаллической решетке представляет интерес с точки зрения радиационного материаловедения, поскольку она является важным фактором в подвижности дислокаций, оказывает влияние на распухание материала и другие свойства.

Классической моделью температурной зависимости константы скорости Γ для активационных процессов в твёрдом теле является уравнение Вайнъярда [1]:

$$\Gamma = \left(\frac{\prod_{j=1}^{3N} \nu_j}{\prod_{j=1}^{3N-1} \nu_{j'}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta U}{k_B T}\right),\tag{1}$$

где v_j, v_j' – нормальные моды кристалла в точке минимума потенциала и в седловой точке процесса соответственно, ΔU – потенциальный барьер процесса, k_B – константа Больцмана.

В работе предложен метод расчета энергии активации диффузии межузельных атомов методом метадинамики [2]. Обсуждаются особенности метода метадинамики применительно к исследованию межузельных атомов, зависимость результата от выбора коллективных переменных, а также методы оценки энтропии миграции.

Исследование выполнено в ОИВТ РАН в рамках работ по контракту с корпорацией Росатом № Н.4х.241.9Б.17.1013.

Литература

- 1. *Vineyard G.H.* Frequency factors and isotope effects in solid state rate processes // J. Phys. Chem. 1957. Solids 3. P. 121–127.
- 2. *Laio A., Gervasio F.L.* Metadynamics: a method to simulate rare events and reconstruct the free energy in biophysics, chemistry and material science // Reports on Progress in Physics. 2008. 71 126601.

УДК 539.2

Эволюционный поиск стабильных форм молекулярных сокристаллов из первых принципов на примере пирфенидона

Е.В. Маслова^{1,2}, В.В. Ройзен¹, А.Р. Оганов^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет) ² Сколковский институт науки и технологий

Молекулярные сокристаллы – это кристаллы, состоящие из двух и более разных молекул. Поиск термодинамически стабильных структур молекулярных сокристаллов является сложной задачей, требующей значительных вычислительных мощностей. Причины этого в том, что молекулы имеют дополнительные внутренние степени свободы, гибкие углы между различными функциональными группами, что серьезно усложняет процесс поиска. Кроме того, молекулы связаны в кристаллах посредством слабых ван-дерваальсовых и водородных связей, для корректного моделирования которых необходимо использование специальных методов. Научный интерес к сокристаллам вызван прежде всего широким потенциалом их практического применения. Одно из наиболее важных и интересных направлений – улучшение характеристик лекарств. Дело в том, что физико-химические свойства сокристалла отличаются от свойств компонентов, из которых он образован. Например, если одна из молекул представляет собой активный фармацевтический компонент (обычно плохо растворимый), а вторая молекула является

хорошо растворимой, полностью абсорбируется телом и вовлечена в ферментативные процессы, то такой молекулярный сокристалл улучшает характеристики лекарства.

Для поиска молекулярных сокристаллов используется метод компьютерного предсказания кристаллических структур USPEX [1–3], который позволяет находить стабильные формы кристаллов эволюционным методом поиска. Для более точного предсказания структуры молекулярного кристалла учитываются частичные заряды, которые образуются на атомах. Для этого, в первую очередь, запускается небольшой расчет USPEX+VASP [4–6] для получения примерных структур сокристаллов. Затем берутся милликеновские заряды, полученные с помощью стороннего кода Gaussian и производится фиттинг зарядов с помощью программы GULP [7] и библиотеки force-field (внешнего потенциала) под названием DREIDING [8]. После этого запускается полный расчет USPEX+VASP и ищутся стабильные конформации.

В работе исследуется кристалл пирфенидона (рис. 1, лекарство для лечения идиопатического легочного фиброза) с дополнительными молекулами этанола.

В первую очередь определяется соотношение молекул пирфенидона и этанола в элементарной ячейке сокристалла с помощью расчета USPEX для переменного состава ячейки. Двумя кандидатами на стабильный сокристалл оказались сокристаллы с соотношением пирфенидон:этанол – 1 : 1 и 1 : 2. Из экспериментальных данных известно, что элементарная ячейка пирфенидона содержит четыре молекулы.

Промежуточные результаты для обоих сокристаллов представлены на рис. 2 и 3. Оба кристалла имеют симметрию P1, значит, самая стабильная конформация еще не найдена.

Также был произведен расчет по поиску структуры самого пирфенидона для итогового сравнения энергий кристаллов и определения стабильности сокристалла. Был получен кристалл пирфенидона (рис. 4) с симметрией P2₁2₁2₁ и с Z = 4.



Рис. 1. Молекула пирфенидона



Рис. 2. Сокристалл пирфенидон+этанол с соотношением 1:1



Рис. 3. Сокристалл пирфенидон+этанол с соотношением 1:2



Рис. 4. Кристалл пирфенидона

- 1. Oganov A.R., Glass C.W. Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques: principles and applications // J. Chem. Phys. 2006. 124, art. 244704.
- Oganov A.R., Lyakhov A.O., Valle M. How evolutionary crystal structure prediction works and why // Acc. Chem. Res. 2011. 44, 227-237.
- Lyakhov A.O., Oganov A.R., Stokes H.T., Zhu Q. New developments in evolutionary structure prediction algorithm USPEX // Comp. Phys. Comm. 2013. 184. 1172–1182.
- 4. Kresse G. and Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B 47, 558. (1993); ibid. 49, 14 251 (1994).
- 5. *Kresse G. and Furthmüller J.* Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // Comput. Mat. Sci. 1996. V. 6. Iss. 15.
- 6. *Kresse G. and Furthmüller J.* Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B. 1996 V. 54. Iss. 16.
- 7. Gale J.D. and Rohl A.L. The General Utility Lattice Program // Mol. Simul. 2003. V. 29. Iss. 5. P. 291-341.
- Stephen L. Mayo, Barry D. Olafson, William A. Goddard. DREIDING: a generic force field for molecular simulations // J. Phys. Chem. 1990. V. 94 (26). P. 8897–8909.

УДК 533.9.01

Сравнение методов моделирования эффекта ion wake в пылевой плазме.

Д.А. Колотинский., А.В. Тимофеев

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Пылевая плазма является многопараметрической системой со сложным видом взаимодействия между пылевыми частицами. К тому же, оказывается невозможным прямое экспериментальное определение типа и параметров этого взаимодействия. Эти факторы существенно ограничивают методы сопоставления результатов компьютерного моделирования с экспериментальными данными. Доступными оказываются только косвенные методы сравнения, такие как, например, сравнение структуры пылевой компоненты, полученной при компьютерном моделировании, с картиной, наблюдаемой в эксперименте. Однако, для получения таких структур при моделировании является необходимым учет наиболее существенных эффектов и сил, действующих в пылевой плазме, к ним относятся: сила тяжести, действующая на пылевую частицу, электрическая сила взаимодействия с ловушкой, потенциал межчастичного взаимодействия, сила трения, термофоретическая сила, сила ионного увлечения и эффект ion wake [1]. Основной проблемой, препятствующей проведению моделирования, является длительное время такого расчета, обусловленное сложностью подзадач, необходимых для решения на каждом шаге интегрирования. Одной из таких подзадач является расчет эффекта ion wake. На данный момент существует несколько моделей, качественно правильно описывающих этот эффект: модель РІС [2] и [3]. К сожалению, данные методы являются чересчур затратными в плане расчетного времени и не годятся для использования в алгоритме программы, описывающей поведения всей системы. Однако существуют и менее затратные методы, например LR-приближение [2] и решение кинетического уравнения при соответствующей симплификации [4]. Для дальнейшего использования одного из этих приближений в расчетной программе необходимо предварительное сравнение результатов, даваемых этими моделями. Сравнение приближенных методов моделирования эффекта ion wake проводится путем сопоставления картины потенциала вокруг пылевой частицы для одного из приближенных методов с соответствующей картиной для более сложного метода. Такое сравнение позволит использовать при моделировании наиболее эффективную модель, что приблизит задачу о моделировании пылевой плазме к ее завершению.

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. № 8. С 495–513.
- 2. Ludwig P., Miloch W.J, L., Kahlert H., Bonitz M. On the wake structure of streaming complex plasmas // New Journal of Physics. 2012.
- 3. Schweigert V. A., Schweigert 1 I. V., Melzer A., Homann A., Piel3 A.. Alignment and instability of dust crystals in plasmas // Physical Review E. 1996. P. 4155–4166.
- 4. *Kompaneets R., Morfill G.E., Ivlev A.V.* Wakes in complex plasma: self-consistent kinetic theory // Physical Review E. 2016. V. 063201. P. 1–8.

УДК 538.913

Анализ колебаний решетки в моделях кристаллического α- и γ-урана

А.С. Антропов

Московский физико-технический институт (государственный университет) Объединённый институт высоких температур РАН

Одним из перспективных путей развития энергетики является использование ядерных реакторов на быстрых нейтронах. При этом количественное описание механических свойств материала, подверженного интенсивному облучению, основывается на рассмотрении динамики дефектов кристаллической решетки.

Стремительный рост доступных вычислительных мощностей позволяет использовать методы компьютерного моделирования для решения данной задачи. В этом случае может быть применен принцип многомасштабного моделирования. Формула Вайнъярда [1] связывает коэффициент диффузии дефектов с собственными частотами кристалла в точке минимума энергии и в седловой точке процесса миграции дефекта. Было также обнаружено, что в металлах с ОЦК-решеткой аномально высокий коэффициент самодиффузии в направлении <111> связан с низкой частотой фононов для соответствующего волнового вектора [2]. Таким образом, спектр собственных колебаний кристаллической решетки (фононный спектр) влияет на скорость диффузии дефектов в кристалле [3].

Целью данного исследования является выявление межатомных потенциалов и методов расчета фононных спектров, которые дают наиболее близкий к экспериментальному результат. Такой анализ позволит в будущем выбирать наиболее точные модели для описания свойств урана и его сплавов, связанных с колебаниями решетки. В работе представлены фононные спектры, отражающие основные особенности рассматриваемых потенциалов и их сравнение с экспериментальными данными [4]. Делаются выводы о точности и границах применимости конкретных потенциалов и методов получения фононных спектров.

В первой части работы исследовано, насколько хорошо рассматриваемые межчастичные потенциалы описывают кристаллические решетки α- и γ-фаз урана. Для этого находится температурная зависимость равновесных параметров элементарной ячейки при нормальном давлении. Во второй части работы рассчитываются фононные спектры α-и γ- урана. Для их нахождения используются три метода – метод динамической матрицы, метод автокорреляционной функции скорости [5] и метод функций Грина [6]. Это позволяет проверить точность каждого метода и выявить условия моделирования, необходимые для его применения. Для каждого из методов были найдены параметры расчета, при которых достигалась сходимость.

Установлено, что все рассматриваемые потенциалы обеспечивают устойчивость γфазы и хорошо воспроизводят параметр а. Однако α-фаза оказалась устойчивой только при потенциале ЕАМ. Результаты расчетов для этого потенциала хорошо согласуются с экспериментом, однако при температуре более 720 К наблюдается резкий скачок всех параметров, что говорит о структурном изменении, которое имеет место при температуре ниже, чем фазовый переход в β-фазу.

Сравнение методов получения фононных спектров показывает, что метод динамической матрицы не применим при высоких температурах в силу ангармонических эффектов. В свою очередь метод функций Грина медленно сходится при низких температурах. Метод автокорреляционной функции скорости дает спектр с тепловым уширением. При этом в диапазонах, где методы применимы, результаты сходятся.

Фононные спектры для ү-фазы при 1113 К были получены всеми рассматриваемыми потенциалами межатомного взаимодействия. Результаты приведены на рис. 1. Лучше всего соответствуют экспериментальным данным результаты потенциала ЕАМ: модель воспроизводит спектр на качественном уровне, хотя и занижает значения частот.



Рис. 1. Фононные спектры γ-урана, рассчитанные при температуре 1113 К методом функций Грина с тепловым уширением с использованием разных межатомных потенциалов; экспериментальные данные обозначены черными точками

- 1. *Vineyard G. H.* Frequency factors and isotope effects in solid state rate processes. // Journal of Physics and Chemistry of Solids.1957. 3(1). 121–127.
- Petry W., Heiming A., Herzig C., & Trampenau J. On the Diffusion Mechanism in bcc Metals, a Neutron Scattering Approach. // Defect and Diffusion Forum. 1991. V. 75. P. 211–228. Trans Tech Publications.
- 3. *Fidanyan K.S., & Stegailov V.V.* Vibrational properties of bcc U and Mo at different temperatures. // Journal of Physics: Conference Series. 2016. V. 774. N 1. P. 012031. IOP Publishing.
- Manley M.E., Fultz B., McQueeney R.J., Brown C.M., Hults W.L., Smith J.L. & Robertson J.L. Large harmonic softening of the phonon density of states of uranium // Physical review letters. 2001. 86(14). 3076.
- 5. *Rahman A*. Correlations in the motion of atoms in liquid argon. // Physical Review. 1964. 136(2A). A405.
- 6. *Kong L.T.* (2011). Phonon dispersion measured directly from molecular dynamics simulations. // Computer Physics Communications. 2011. 182(10). 2201–2207.

УДК 539.21

Конкуренция масштабов как механизм стеклования и кристаллизации

Р.Е. Рыльцев¹, Н.М. Щелкачев^{2,3}

¹Институт металлургии УрО РАН

²Московский физико-технический институт (государственный университет) ³Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН

В последние годы было обнаружено, что многие сложные эффекты в конденсированных системах могут быть качественно объяснены наличием двух

характерных масштабов в потенциале межчастичного взаимодействия. Потенциалы, обладающие таким свойством, возникают при построении эффективных взаимодействий в металлических сплавах, жидкостях с направленными связями, коллоидных системах. Было показано, что конкуренция между масштабами может приводить к полиморфизму, водоподобным аномалиям и стекольной динамике [1]. В этой связи является интересным исследование конкуренции между масштабами на процессы структурообразования и динамические свойства.

С помощью метода молекулярной динамики мы показали, что, в зависимости от соотношения между характерными межчастичными расстояниями и их эффективной концентрации, однокомпонентная система с двухмасштабным отталкивающим потенциалом может демонстрировать различные динамические и структурные свойства при квазиравновесном охлаждении. В некоторых случаях фрустрации, обусловленные конкуренцией масштабов, подавляют кристаллизацию, и наблюдается стекольное поведение, сопровождаемое экстремально большими отклонениями температурных зависимостей транспортных свойств от закона Аррениуса [1]. В других случаях наличие второго масштаба стабилизирует локальный икосаэдрический порядок, что приводит к переходу из жидкости в фазу декагонального квазикристалла [2]. Возможно также образование разнообразных кристаллических структур с нетривиальной для простых однокомпонентных систем симметрией.

Было показано, что многие особенности поведения структурных и динамических свойств универсальны и не зависят от особенностей межчастичного потенциала.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке Российской Федерации (Соглашение № 05. Y09.21.0018) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-02-00295).

Литература

 Ryltsev R.E., Chtchelkatchev N.M., Ryzhov V. Superfragile glassy dynamics of a one-component system with isotropic potential: Competition of diffusion and frustration // Phys. Rev. Lett. 2013 V. 110. P. 025701.

Ryltsev R.E., Chtchelkatchev N.M. Universal self-assembly of one-component three-dimensional dodecagonal quasicrystals // Soft Matter. 2017. V. 13. P. 5076.

Секция квантовых явлений в сверхпроводящих системах

УДК 538.945

Магнитно-силовая микроскопия поверхности ферромагнитного сверхпроводника EuFe₂(As_{0.79}P_{0.21})₂

С.Ю. Гребенчук¹, И.С. Вещунов^{1,2}, В.С. Столяров^{1,3,5}, Д.С. Баранов^{1,3,4}, И.А. Головчанский^{1,5}, Л.Я. Винников³, Д.Ю. Родичев^{4,1}, А.А. Голубов^{1,6}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Department of Applied Physics, The University of Tokyo ³Институт физики твердого тела РАН ⁴Laboratoire de physique et d'etude des materiaux, LPEM-UMR8213/CNRS-ESPCI ParisTech-UPMC ⁵Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» ⁶MESA+ Institute for Nanotechnology, University of Twente

Взаимодействие сверхпроводимости и ферромагнетизма является одной из самых интересных и давних загадок в физике. Обычно сильное обменное поле ферромагнетика подавляет сверхпроводимость из-за парамагнитного эффекта. На данный момент в мире исследовано огромное количество искусственных гибридных структур, комбинирующих в себе магнитные и сверхпроводящие материалы. На таких гибридах было открыто множество эффектов, уже применяемых в сверхпроводящей электронике. Но только недавно с открытием железосодержащих сверхпроводников стало возможным изучить условия сосуществования двух антагонистических явлений, реализуемых на атомном масштабе, в монокристалле. Так, в исследуемом соединении EuFe₂(As_{0.79}P_{0.21})₂, которое становится сверхпроводником при температуре $T_{sc} = 25$ K, а затем и ферромагнетиком при температурах ниже 19 K, сосуществование двух антагонистических явлений становится возможным благодаря нетипично слабому для обычных ферромагнетиков обменному полю магнитной подсистемы Еu.

Методом низкотемпературной магнитно-силовой микроскопии исследована микроструктура магнитного потока ферромагнитного сверхпроводника EuFe₂(As_{0.79}P_{0.21})₂ при прецизионном изменении температуры образца от 4 К до 28 К, а также при различных значениях внешнего магнитного поля, приложенного перпендикулярно исследуемой поверхности.

В температурном интервале 18–22 К в магнитном фазовом контрасте наблюдались вихри Абрикосова (рис. 1с), появление которых характерно для сверхпроводников второго рода. При дальнейшем понижении температуры на поверхности отчетливо проявлялась доменная структура, типичная для ферромагнетиков с перпендикулярной магнитной анизотропией (рис. 1b), что наглядно, впервые прямым МСМ-экспериментом, подтвердило, что монокристалл обладает как сверхпроводящими, так и ферромагнитными свойствами.

Исследования проводятся в рамках Договора между МФТИ и ВШЭ, где МФТИ – соисполнитель по Соглашению №14.617.21.001, идентификатор проекта RFMEF161717X0001.



Рис. 1. Изображение топографии и магнитной структуры на поверхности монокристалла EuFe₂(As_{0.79}P_{0.21})₂. Размер поля сканирования 8,7 × 10 мкм² (а) – топография поверхности в состоянии магнитного насыщения ферромагнитной подсистемы Eu²⁺ поле *H* = −0,9 Tл, параллельном оси с; (b) – доменная магнитная структура после охлаждения в режиме ZFC до минимальной температуры *T*_{min} = 4,16 K с последующим отогревом до *T* = 17,27 K; (c) – вихревая структура, полученная после охлажденияпри *T* = 18,15 K и с остаточной индукцией $Φ_0/a^2 \sim 6 \Gamma c$

 Veshchunov I.S., Vinnikov L.Ya., Stolyarov V.S., Zhou N., Shi Z.X., Xu X.F., Grebenchuk S.Yu., Baranov D.S., Golovchanskiy I.A., Pyon S., Yue Sun, Wenhe Jiao, Guanghan Cao, Tamegai T., Golubov A.A. Visualization of the Magnetic Flux Structure in Phosphorus-Doped EuFe₂As₂ Single Crystals // JETP Letter. 2017. V. 105. N 2. P. 98–102.

УДК 538.945

Микромагнитное моделирование эллиптических магнитных джозефсоновских контактов

Р.А. Оганнисян¹, И.А. Головчанский^{1,3}, В.С. Столяров^{1,2,3}, А.А. Голубов^{1,4}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт физики твердого тела РАН

³Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» ⁴MESA+ Institute for Nanotechnology, University of Twente

В данной работе применяется микромагнитный подход для моделирования зависимости критического тока от внешнего магнитного поля в джозефсоновском контакте с ферромагнитным слоем Pd_xFe_{1-x} с малой концентрацией железа для сравнения двух форм джозефсоновских контактов (эллиптический и прямоугольный). Данный подход состоит в численном решении уравнения Ландау–Лифшица–Гильберта, которое описывает зависимость локальной намагниченности от внешнего поля $\vec{M}(\vec{H})$.

Для проверки самой модели были использованы методы, предложенный в статье [1], и экспериментальные данные, приведённые в статье [2]. Результаты сравнения численных и экспериментальных результатов приведены на рис. 1а. Как можно заметить, экспериментальные и численные результаты хорошо согласуются, и данный метод подходит для моделирования таких контактов.

После проверки при тех же параметрах был смоделирован эллиптический контакт, но с другими размерами, и те же самые вычисления были произведены для прямоугольного контакта, для сравнения (рис. 16). Рассматривая рис. 16, можно заметить сдвиг в сторону больших полей максимума критического тока у эллиптической формы. Объясняется это ужесточением граничных условий, а также тем, что определяющей силой (взаимодействием) при таких размерах является магнитостатическое поле. Уменьшение размеров (площади) образца приводит к уменьшению этого взаимодействия и увеличению влияния обменного взаимодействия. Таким образом, разработанная модель позволяет исследовать джозефсоновские контакты разных размеров и форм и сравнить их преимущества относительно друг друга.

Исследования проводятся в рамках Договора между МФТИ и ВШЭ, где МФТИ – соисполнитель по Соглашению №14.617.21.001, идентификатор проекта RFMEF161717X0001.



Рис.1. (а) Экспериментальная и модельная зависимость критического тока от внешнего магнитного поля для прямоугольного контакта; (б) модельные зависимости, прямоугольный и эллиптический случаи

Литература

- 1. Golovchanskiy I.A., Bol'ginov V.V., Stolyarov V.S., Abramov N.N., Ben Hamida A., Emelyanova O.V., Stolyarov B.S., Kupriyanov M.Yu., Golubov A.A., Ryazanov V.V. // Physical Review B. 2016. 94. 214514.
- 2. Bolginov V.V., Stolyarov V.S., Sobanin D.S., Karpovich A.L., Ryazanov V.V. // JETP Lett. 2012. 95. 366.

УДК 534.14

Развитие методов исследования живых клеток атомно-силовой микроскопией и высокочувствительным гидрофоном с графеновой мембраной

Р.Р. Галиев^{1,2}, И.А. Гуков^{1,2}, В.В. Дремов¹

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Сколковский институт науки и технологий

Среди огромного разнообразия методов исследования биологических объектов на клеточном уровне [1–3] сравнительно недавно появилась методика исследования динамики живых клеток методами атомно-силовой микроскопии. Многие биологические процессы, происходящие в клетках, зависят от механических свойств клеточных подструктур и клеточной мембраны. Поэтому информация о клеточных процессах может быть извлечена из её механических свойств. Например, исследование локальных механических свойств отдельных клеток проводилось с помощью атомно-силового микроскопа [3]. Однако атомно-силовая микроскопия не пригодна для исследования свойства ансамбля клеток. Для исследования свойств ансамбля клеток применяются высокочувствутельные гидрофоны разных конструкций [1, 2].

В данной работе мы сконструировали высокочувствительный гидрофон (600 нм/Па) на основе мембраны из графена (рис. 1). Также была изучена возможность исследования коллективного колебания кардиомиоцитов при помощи сконструированного гидрофона. Параллельно колебания одного крадиомиоцита наблюдались посредством атомно-силового микроскопа (рис. 2).

Общая конструкция гидрофона схематично приведена на рис. 1а. Оптоволоконный интерферометр собран на основе интерферометра Фабри–Перо, где в качестве зеркал

выступают торец оптоволокна и графеновая мембрана. Для увеличения отражающей способности графеновая мембрана была покрыта тонким слоем металла (10 нм). Важно отметить, что в данной конструкции графен играет роль армирующего и водоотталкивающего материала. Для того чтобы приклеить графеновую мембрану на капилляр, торец капилляра клеился на кремниевую подложку графена с никелевой прослойкой. После никелевая прослойка стравливалась раствором соляной кислоты. В итоге кремниевая подложка спадает, а на торце капилляра остается натянутая графеновая мембрана.

Чувствительность мембраны нашего гидрофона 600 нм/Па, что приблизительно на три порядка выше чувствительности мембран современных высокочувствительных микрофонов [1, 2]. Однако чувствительность мембраны характеризует только мембрану микрофона. Полную характеристику микрофона определяет минимальное детектируемое давление, которое зависит от чувствительности мембраны и от шумов измерительной схемы. Шумы нашей измерительной схемы (шум лазера) на два порядка выше, чем шумы аналогичных измерительных схем современных гидрофонов на принципе работы интерферометра Фабри–Перо [1, 2]. Поэтому минимально детектируемое давление нашего гидрофона сравнимо с минимально детектируемым давлением современных высокочувствительных гидрофонов 10 мкПа/√Гц. Однако если заменить наш лазер (0,1 мкВ/√Гц) на более современный, то минимально детектируемое давление нашего гидрофона составит 0,1 мкПа/√Гц.

К сожалению, нам не удалось измерить коллективное колебание кардиомиоцитов. Тем не менее мы показали, что чувствительность нашего гидрофона превосходит аналогичные конструкции (оптоволоконных интерферометров на графеновых мембранах). Отличительной особенностью нашего гидрофона является использование графенового монослоя с инертным металлическим покрытием и отсутствие дорогостоящего оборудования, перестраиваемого лазера. Мы продемонстрировали надежность данной конструкций микрофона в жидкой среде (герметичность конструкций). Наличие графенового слоя обращенной к жидкой среде (физиологического раствора) позволяет надеяться на высокую долговечность работы в физиологической среде. Таким образом, мы изготовили действующий, простой и надежный прибор (гидрофон), способный работать в биоактивной среде.



Рис. 1. а) Схематическая конструкция гидрофона; b) капилляр с графеновой мембраной диаметром 2 мм



Рис. 2. а) Процесс подвода кантилевера к кардиомиоциту; b) колебания мембраны кардиомиоцита

- Jun Ma, Haifeng Xuan, Xoi Lut Ho, Wei Jin, Yuanhong Yang, Shangchun Fan. Multi-layer graphene diaphragm-based Fabry-Perot interferometer for acoustic detection with long term stability // OSA. 2016.
- 2. Onur Can Akkaya, Member, Michel J. F. Digonnet, Gordon S. Kino, and Olav Solgaard. U Modeling and demonstration of thermally stable high-sensitivity reproducible acoustic sensors // Journal of microelectromechanical systems. 2012.
- 3. Andrew E. Pelling, Sadaf Sehati, Edith B. Gralla, Joan S. Valentine, James K. Gimzewski., Kaczmarek B., Szarszewska P. Influence of Local nanomechanical motion of the cell wall of saccharomyces cereviasiae // Science. 2004.

УДК 538.945

Исследование свойств планарных джозефсоновских структур методом магнитно-силовой микроскопии

А.Г. Шишкин^{1,2}, Д.С. Баранов^{1,2}, С.Ю. Гребенчук¹, В.В Дремов¹, А.А. Голубов^{1,3}, В.С. Столяров^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет) ² Институт физики твердого тела РАН ³ MESA+ Institute for Nanotechnology, University of Twente

Джозефсоновские контакты получили широкое распространение с развитием сверхпроводниковой цифровой и квантовой электроники. Одним из примеров джозефсоновских контактов являются структуры сверхпроводник/нормальный металл/сверхпроводник (SNS). Исследование таких структур связано с реализацией на них спиновых вентилей, инверторов сверхпроводящей фазы, сверхнизкотемпературных термометров и других сверхпроводниковых устройств [1–3].

Джозефсоновская связь SNS типа образуется благодаря эффекту близости на границе нормального металла со сверхпроводником: волновая функция одного из сверхпроводящих берегов, наведённая в нормальный металл, экспоненциально затухает, при этом встречная волновая функция от другого берега при определенных размерах области нормального металла (порядка нескольких длин когерентности куперовской пары в нормальном металле) перекрывается с экспоненциально затухающей наведенной волновой функцией от другого сверхпроводящего берега. В случае если реализуется режим «широкого контакта», т.е. ширина контакта, определяющаяся джозефсоновской глубиной проникновения магнитного поля, много больше, чем его длина, то в присутствии внешнего, перпендикулярного структуре, магнитного поля в области нормального металла может зародиться вихрь джозефсона. При зарождении такого вихря возникает набег фазы

сверхпроводящей волновой функции, связывающей два берега, на 180 градусов, а значит, используя вихрь джозефсона можно реализовать инверсию фазы протекающего сквозь нее сверхтока. Например, при электронно-транспортных измерениях такой структуры это приводит к осцилляциям её критического тока в зависимости от величины приложенного внешнего магнитного поля (фраунгоферовская зависимость). Кроме того, вихри джозефсона могут генерироваться в области SNS-связи и в отсутствие внешнего магнитного поля [4], что имеет особый практический интерес при реализации квантовых логических устройств.

В данной работе мы демонстрируем зондовый магнитно-силовой метод исследования в качестве бесконтактного способа изучения SNS-структур. Изучаемый нами «широкий» SNS-контакт приготовлен методами электронной литографии и теневого напыления. В качестве сверхпроводника была использована пленка ниобия толщиной 100 нм и критической температурой сверхпроводящего перехода ~ 8,5 К, в качестве нормального металла пленка меди толщиной в 30 нм (SEM изображение на рис. 1a). После изготовления образец был помещен в атомно-силовой микроскоп AttoCube AttoDRY 1000/SU и охлажден до ~ 5,4 К. В качестве зонда использовался магнитный кантилевер с кобальт-платиновым покрытием. Пространственное распределение магнитного поля над поверхностью определялось по сдвигу резонансной частоты кантилевера – Δf B ходе измерений был обнаружен эффект сильного локального взаимодействия зонда в области джозефсоновского перехода. При взаимодействии магнитного момента зонда микроскопа с магнитным сигналом от поверхности образуются характерные линии в виде «полумесяцев» поперек *N*-области SNS-контакта (см. рис. 1b (обозначено стрелками)). Их присутствие мы связываем с проникновением в область джозефсоновской слабой связи вихрей джозефсона. Кроме того, обнаружено влияние температуры и внешнего, перпендикулярного структуре, магнитного поля на появление и положение этих линий.

Таким образом, была продемонстрирована возможность исследования SNSструктур методами магнитно-силовой микроскопии. Исследования продолжаются в рамках Договора между МФТИ и ВШЭ, где МФТИ – соисполнитель по Соглашению №14.617.21.001, идентификатор проекта RFMEF161717X0001.



Рис. 1. (a) – 2,7 мкм × 2,7 мкм, изображение структуры полученное на сканирующем электронном микроскопе, (b) – МFM изображение 2,7 мкм × 2,7 мкм той же структуры, полученной в режиме liftmode с фиксацией смещения резонансной частоты Δ*f*

Литература

- <u>Najafi Jabdaraghi, Robab; Peltonen, Joonas;</u> Saira, Olli-Pentti<u>; Pekola, Jukka</u>, Low-temperature characterization of Nb-Cu-Nb weak links with Ar ion-cleaned interfaces// Applied Physics Letters. 2016. V. 108. N 4.
- 2. Skryabina O.V., Egorov S.V., Goncharova A.S. [et al.] Josephson coupling across a long singlecrystalline Cu nanowire// Applied Physics Letters. 2017. V. 110. N 222605.
- Golikova T.E., Hüblerb F., Beckmann D., Klenov N.V., Bakurskiy S.V., Kupriyanov M.Yu., Batov I.E., Ryazanov V.V. Critical current in planar SNS Josephson junctions // JETP Letters. 2012. V. 96. N 10. P. 668–673.

 Dimitri Roditchev, Christophe Brun, Lise Serrier-Garcia, Juan Carlos Cuevas, Vagner Henrique Loiola Bessa, Milorad Vlado Milošević, François Debontridder, Vasily Stolyarov, Tristan Cren, Direct observation of Josephson vortex // Nature Phys. 2015. 11. 332.

УДК 538.945

RFMEF161717X0001.

Измерение глубины проникновения магнитного поля в магнитный сверхпроводник EuFe₂As_{2x}P_x с помощью магнитно-силовой микроскопии

В.В. Дрёмов^{1,2}, Н.М. Лебедев¹

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт физики твердого тела РАН

В последнее время класс сверхпроводящих веществ пополнился материалами, сочетающими в себе свойства сверхпроводников и ферромагнетиков – магнитными сверхпроводниками. Эти объекты обладают рядом новых свойств, возникающих из-за взаимодействия магнитного и сверхпроводящего упорядочения, и могут быть использованы для создания новых приборов. Одной из фундаментальных характеристик сверхпроводников является глубина проникновения магнитного поля в сверхпроводник: λ . В нашем эксперименте мы исследовали зависимость $\lambda(T)$ в магнитном сверхпроводнике EuFe₂As_{2x}P_x. Предыдущие исследования [1] показали, что в таком сверхпроводнике критическая температура $T_{C} = 22 K$, а точка Кюри $T_{K} = 19 K$.

Для изучения $\lambda(T)$ использовался силовой микроскоп фирмы attocube с магнитной иглой в полуконтактном режиме. На основе методики частотной модуляции определялся сдвиг резонансной частоты кантилевера с иглой в зависимости от расстояния до образца, что позволяло определить зависимость градиента силы взаимодействия иглы с образцом от расстояния до него при различных температурах как выше, так и ниже критической. Полученная зависимость $\frac{\partial f}{\partial z}(z)$ аппроксимировалась суммой функций вида $\frac{A}{z+\lambda(T)} - \frac{B(T)}{z}$, что позволило учесть как парамагнитное притяжение, так и диамагнитное отталкивание, возникающее при температуре ниже T_C . Функция была выбрана на основе модели взаимодействия конической иглы с образцом по методу изображений. Проанализировав поведение параметра B(T) выше T_C , мы пришли к выводу, что оно хорошо согласуется с законом Кюри-Вейсса $\chi = \frac{c}{T-T_K}$, что позволило сравнить T_K с известным результатом и получить подтверждение состоятельности нашей модели. В интервале температуро т T_K до T_C мы изучили поведение функции $\frac{A}{z+\lambda(T)}$, чтобы рассчитать значение $\lambda(0)$ и T_C , исходя из зависимости $\lambda^2(T) = \frac{\lambda^2(0)T_C^4}{T_C^4-T^4}$. Полученное значение глубины проникновения $\lambda(0) =$

350 нм. Величина T_C ≅ 21, 5 К также хорошо согласуется с литературными данными [1].
 Исследования продолжаются в рамках Договора между МФТИ и ВШЭ, где МФТИ
 – соисполнитель по Соглашению №14.617.21.001, идентификатор проекта

Литература

- 1. Вещунов И.С., Винников Л.Я., Столяров В.С., Чжоу Н., Ши Ч.С., Сю С.Ф. Визуализация структуры магнитного потока в допированных фосфором монокристаллах EuFe₂As₂ // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т 105, № 2. С. 87–92.
- Luan Lan, Ophir M. Auslaender, Thomas M. Lippman, Clifford W. Hicks, Beena Kalisky, Jiun-haw Chu, James G. Analytis, Ian R. Fisher, John R. Kirtley, Kathryn A. Moler. Local Measurement of the Penetration Depth in the Pnictide Superconductor Ba(Fe_{0.95}Co_{0.05})₂As₂ // Physical Review. B. 2010. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.100501
- Nandi S., Jin W.T., Xiao Y., Su Y., Price S., Shukla D. K., Strempfer J., Jeevan H. S., Gegenwart P., Brückel Th. Coexistence of Superconductivity and Ferromagnetism in P-Doped EuFe₂As₂ // Phys. Rev. B. 2014. 89. 014512.

Секция физики квантовых технологий и квантовой информации

УДК 530.145

Оптимальная нелинейная фильтрация квантовых состояний

В.А. Манько^{1,2}, Л.А. Маркович^{2,3,4}

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН ²Московский физико-технический институт (государственный университет) ³Институт проблем управления им. Трапезникова РАН ⁴Институт проблем передачи информации им. Харкевича РАН

В настоящее время экспериментальная база квантовой механики стремительно развивается. В связи с этим возникает необходимость в распространении результатов, известных в классической теории вероятностей, фильтрации и контроля к квантовым проблемам. Измеряя физические величины, экспериментаторы сталкиваются с такими проблемами, как проблема оптимальных измерений [1] и проблема квантовой фильтрации [2]. Например, наблюдаемая случайная величина может содержать смесь из интересующей ненаблюдаемой величины и шума. Также интересующая система может быть недоступна для измерения, и информацию о ней можно получить по измерениям на пробной системе, как-то объединенной с исходной. В обоих случаях информация о состоянии ненаблюдаемой квантовой системы «фильтруется» по измерениям на наблюдаемой измерения информации и оценок путем отображения данных измерений в пространство состояний.

В работе рассмотрена модель слабых измерений, где ненаблюдаемая квантовая система объединяется с пробной системой, которую можно измерить (система-датчик). Используются измерения фон Неймана, задаваемые набором проекционных операторов. Каждый оператор описывает, что происходит на одном из возможных исходов измерения, производящегося на множестве копий одной и той же системы, находящихся в одном состоянии. Описанная модель наблюдения основа на системе из двух кубитов. Однако также возникает необходимость исследовать системы из одного кудита. Таким системам присущи понятия запутанности, сепарабельности, стиринга и т. д. Целью работы является предложение модели наблюдения для системы из одного кудита. Предложенные модели, как для двух кубитов, так и для одного кудита, могут быть нелинейными. В этом случае известный метод фильтра Калмана для решения задачи фильтрации неприменим [3]. Таким образом, возникает необходимость в построении метода, дающего оптимальное решения для нелинейных моделей.

В [4] известная процедура в области классической теория управления, а именно фильтрация Калмана [3], была применена к области квантовой фильтрации. Проблема фильтрации неизвестных сигналов из смеси с шумом хорошо изучена в классической теории вероятностей. Фильтр Калмана обеспечивает оптимальное решение для линейной рекуррентной модели наблюдения. Однако для нелинейных моделей, которые часто встречаются на практике, фильтр Калмана неприменим.

Как было показано в [5], квантовые состояния могут быть описаны функцией распределения вероятности, называемой квантовой томограммой. Это означает, что матрицы плотности или векторы в гильбертовых пространствах могут быть отображены на вероятностные распределения. Ввиду этой процедуры фильтрации, известные в классической теории вероятностей, применимы в квантовом случае.

В данной работе сформулирована проблема фильтрации частично наблюдаемого Марковского квантового процесса, где оптимальная оценка ненаблюдаемой компоненты

основана на наблюдениях. Для решения фильтрационной задачи предложено использовать общее уравнение фильтрации [6]. Далее предложена модель наблюдения для системы из одного кудита и метод оптимальный фильтрации. Построение такого типа моделей наблюдений полезно в свете возможного практического использования одночастичных квантовых систем. Эксперимент может быть поставлен таким образом, что возможно измерить населенность только на определенных уровнях многоуровневого атома, в то время как другие уровни недоступны для измерения.

Это может быть связано с их коротким временем жизни или разнесенностью частот. Тогда предложенная модель позволяет извлекать информацию о недоступных уровнях, измеряя только доступные. Наконец, введено томографическое представление модели наблюдения и показана временная эволюция квантовой информации, которая иллюстрирует корреляционные изменения в квантовой системе.

Исследование выполнено в ИППИ РАН за счет гранта Российского научного фонда (проект № 14–50–00150).

Литература

- 1. Edwards S.C., Belavkin V.P. quant-ph/0506018 University of Nottingham. 2005.
- 2. *Белавкин В.П.* // Радиотехника и электроника. 1980. 25. С. 1445–1453.
- 3. Kalman R.E. // Journal of Basic Engineering. 1960. 82(1). P. 35-45.
- 4. Ruppert L. // Technical report SCL. 2012. 001.
- 5. Mancini S., Tombesi P., Man'ko Symplectic V.I. // Phys. Lett. A. 1996. 213(1).
- 6. Stratonovich R.L. // Theory of Probability and its Applications. 1960. 5. P. 156–178.

УДК 535.513.1

Криптосистемы, используемые в квантовой критографии

Зар Ни Аунг, Т.Ф. Камалов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Применение шифров началось несколько тысяч лет назад, и с тех пор было изобретено огромное количество технологий шифрования с разной степенью надежности. Рассмотрим некоторые из наиболее известных из самых ранних способов защиты информации [1, 2]. Квантовая криптография – это метод защиты коммуникаций, основанный на принципах квантовой физики. В отличие от традиционной криптографии, которая использует математические методы для обеспечения секретности информации, квантовая криптография посвящена случаям передачи информации с помощью объектов квантовой механики. Квантовая криптография использует одиночные фотоны в качестве носителя данных, поэтому при перехвате они не дойдут до адресата, что сразу станет сигналом шпионажа.

Симметричная криптосистема – это система с секретным ключом. В этих системах один секретный ключ используется как для шифрования, так и для дешифрования передаваемой информации. В этом случае Алиса и Боб владеют какой-то секретной информацией. В текущем состоянии Евы ключ не отвечает. Есть этапы Ключ абсолютно случайный;

Длина ключа в битах не меньше длины сообщения;

Ключ используется только один раз.

Система с открытым ключом называется несимметричной криптосистемой. Эти системы имеют дело с парами ключей. Для шифрования используется открытый ключ, и для дешифрования используется секретный ключ. Если кто-то отправляет вам сообщение, он шифрует его своим открытым ключом. И когда вы расшифровываете его, вам нужно использовать секретный ключ.

Существует несколько решений для распределения или передачи ключей [3]:

- 1. физическое распределение,
- 2. распределение с использованием протоколов с секретным ключом,

- 3. распространение с использованием протоколов открытых ключей,
- 4. распределение квантовых ключей.

- 1. *Rybakov Yu.P., Kamalov T.F.* Bell's Theorem and Entangled Solitons, International // Journal of Theoretical Physics. 2016. V. 55, 9. P. 4075–4080.
- 2. *Kamalov T.F., Rybakov Y.P.* Probabilistic simulation of quantum computation // Quantum Computers and Computing. 2006. V. 6. N 1. P. 125–136.
- 3. Clepov N. Quantum cryptography: the transmission of quantum key. 2006. P. 54-56.

УДК 530.145

Влияние проводящей поверхности на основное состояние зарядового кубита *А.Н. Глинов, С.Н. Филиппов*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Динамика электронных состояний в двойной квантовой точке описывается гамильтонианом $\hat{H}_d = \Delta \hat{\sigma}_x + \frac{\omega}{2} \hat{\sigma}_z$, где Δ – энергия туннелирования, ω – начальная разность энергий между уровнями точек по отдельности.

В случае двойной квантовой точки, находящейся вблизи поверхности металла (на расстоянии, достаточно малом для того, чтобы проявлялись эффекты электростатического взаимодействия с носителями заряда, но достаточно большом для того, чтобы отсутствовало туннелирование в металл или «запирание» (confinement) электрона в одной из точек), предлагается описывать динамику системы «двойная квантовая точка – металл» модельным гамильтонианом $\hat{H}_{sys} = \hat{H}_d \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{H}_{me} + \hat{H}_{int}$, действующим в пространстве $\mathbf{H}_d \otimes \mathbf{H}_{me}$. Дадим некоторые пояснения.

Первое слагаемое гамильтониана описывает динамику отдельно точки, второе отдельно металла (точнее зарядовых состояний в металле), третье – взаимодействие между металлом и точкой. H_d – двумерное гильбертово пространство точки (с выбранным базисом нормированных векторов $\{|L\rangle, |R\rangle\}$, векторы которого отвечают нахождению электрона соответственно в левой и правой потенциальных ямах с вероятностью 1). $\mathbf{H}_{me} - (N+1)$ мерное гильбертово пространство бозонных состояний металла, записываемых в представлении чисел заполнения В виде ортогональных состояний $|n_1,n_2\rangle$ (ортогональность обеспечивается фактчески за счёт достаточно большого расстояния между точками, составляющими кубит), N – общее число положительно заряженных «дырок» такое, что $n_1 + n_2 = N$. Диссипацией энергии в данной модели пренебрегаем.

Указанные состояния металла физически отвечают распределению зарядовизображений на поверхности проводника. Первые попытки описать их появлением зарядов-изображений, равных $e \times |\psi_i|^2$, i = 1, 2 (ψ_i – значение волновой функции электрона соответственно в первой и второй потенциальных ямах двойной квантовой точки), сделанные впервые в работах [1, 2], привели к проблеме нелинейности гамильтониана в задаче описания динамики системы. Однако этой проблеме не уделяется должного внимания и в сравнительно современных статьях (например, [3–5]), хотя сам подход авторами и применяется. При этом в указанных источниках не учитывается взаимодействие индуцированных на поверхности проводника зарядов.

В докладе описывается непосредственное построение гамильтониана системы и применение приведённой выше модели для исследования стационарных состояний и

динамики системы на основе уравнения Лиувилля-фон Неймана: $\frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] = \frac{d\hat{\rho}}{dt}$, где $\hat{\rho}$ –

оператор (матрица) плотности системы.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 16-11-00084) в Московском физико-техническом институте (государственном университете).

Литература

- 1. *Hartstein A., Weinberg Z.* On the nature of the image force in quantum mechanics with application to photon assisted tunneling and photoemission // Journal of Physics C: Solid State Physics 11. 1978. L471–L472.
- 2. *Hartstein A.* [*et al.*]. Experimental test of the quantum-mechanical image-force theory // Physical Review B. 1982. P. 7174–7182.
- 3. *Bednarek S.* [*et al.*]. Electron soliton in semiconductor nanostructures // Physical Review B 72. 2005. P. 075319-1 075319-5.
- Szumniak P. [et al.]. Long-distance entanglement of soliton spin qubits in gated nanowires // Physical Review B 92. 2015. P. 035403-1 – 035403-6.
- 5. Chibisov M.I., Roitman A.V. Perturbation of atomic energy levels by a metal surface // Journal of experimental and theoretical physics. 1999. V. 89. N 1. P. 129–139.

УДК 53.043, 535.14, 535.012.21

Поляризация и перепутывание бифотонов в неколлинеарном режиме спонтанного параметрического рассеяния света

М.В. Фёдоров^{1,2}, С.В. Винцкевич^{1,2}, Д.А. Григорьев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ² Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Перепутывание бифотонных состояний, сформированных в результате спонтанного параметрического рассеяния света (СПРС), – активно исследуемая область в рамках современной квантовой оптики и квантовой информатики. Один из наиболее часто рассматриваемых типов перепутывания связывают с поляризационной степенью свободы. Поляризационные состояния просты как в описании, так и в экспериментальной реализации [1-3]. В предлагаемой работе рассматривается неколлинеарный режим рождения бифотонов с одинаковой частотой и синхронизмом первого типа $e \to o, o$ в СПРС. В данном процессе степень перепутывания существенно зависит от длины волны накачки, частотного закона дисперсии для показателя преломления, а также от направления волновых векторов накачки и бифотонов. Как показано в работе [4], для определённых параметров кристалла и свойств накачки волновая функция бифотонов факторизуется на произведение двух функций. Одна из этих функций зависит только от полярных углов, в то время как другая функция зависит только от азимутальных углов, а их произведение даёт полное угловое распределение бифотонов. Для такого распределения легко экспериментально найти степень перепутывания с помощью измерения условной и безусловной вероятностей в процессе детектирования. С другой стороны, зная волновую функцию бифотонов, также можно установить зависимость поляризации от углового распределения. Для практической реализации особо интересна зависимость поляризации в плоскости, перпендикулярной направлению распространения фотонов, т.е. зависимость от азимутального угла. Выделяя бифотонные состояния с разной поляризацией в каждой «угловой» моде, их перепутывание легко исследовать в известной схеме Хонга-У-Манделя [5]. В эксперименте требуется знать, как устроена зависимость поляризации углового распределения бифотонов после прохождения границы кристалла и оптических элементов. В частности, такая зависимость появляется в результате анизотропии кристалла, преломления на границе, прохождении через оптические элементы, что подробно изучено в этой работе. С помощью таких поляризационных состояний и схемы Хонга-У-Манделя

предложен метод разделения состояний на отдельные моды, исследуемые в дальнейшем по схеме совпадений, что может быть полезно в прикладных задачах с использованием перепутывания.

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики «БАЗИС» (грант № 17-15-603-1)

Литература

- 1. Fedorov M.V., Volkov P.A, Mikhailova J.M., Straupe S.S., Kulik S.P. Entanglement of biphoton states: qutrits and ququarts // New Journal of Physics 13. 2011. 083004. P. 32.
- Chekhova M.V., Fedorov M.V. The Schmidt modes of biphoton qutrits: Poincar'e-sphere epresentation // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2013. 46. 095502. P. 10.
- 3. Кривицкий Л.А., Кулик С.П., Масленников Г.А., Чехова М.В. Поляризационные свойства одномодовых бифотонов // Квантовая электроника. 2005. 35. №1.

4. *Fedorov M.V.* Azimuthal entanglement and multichannel Schmidt-type decomposition of noncollinear biphotons // Phys. Rev. A 93. 2016. 033830.

5. Hong C.K., Ou Z.Y., Mandel L. Measurements of Subpicosecond intervals between two photons by interference // Phys. Rev. Letters. 1987. V. 59. N 18.

УДК 535.14

Корреляционные свойства бифотонов в «субколлинеарном» режиме спонтанного параметрического рассеяния типа I

М.В. Федоров^{1,2}, С.В. Винцкевич^{1,2}, Д.А. Григорьев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ² Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

На данный момент многие свойства процесса спонтанного параметрического рассеяния хорошо изучены [1]. Однако существуют условия за рамками стандартных приближений, требующие отдельного и детального анализа. В частности, в приближении гауссовой накачки при уменьшении угла между центральным волновым вектором накачки и оптической осью возникают коллинеарный, а после – субколлинеарный режимы. Описание этих режимов для СПРС типа II хорошо известно [2], кроме того показано, как субколлинеарный режим может быть использован для получения сильно скоррелированных бифотонов [3]. Напротив, подобные режимы в случае СПРС типа I исследованы в значительно меньшей степени.

В данной работе теоретически и численно изучались корреляционные свойства бифотонов в субколлинеарном режиме СПРС типа І. Показано, что вследствие анизотропии показателя преломления кристалла процесс СПРС реализуется при углах наклона оптической оси, меньших, чем $\varphi_0 = 0, 5$. Основные выражения, описывающие процесс параметрического рассеяния, взяты из работ [4, 5]. Отправной точкой для дальнейших рассуждений является волновая функция бифотонов в *k*-представлении, учитывающая то, что поперечные размеры кристалла достаточно велики, чтобы в поперечной плоскости выполнялся полный фазовый синхронизм. Для данной волновой функции производится детальный анализ упрощений и приближений, справедливых в условиях субколлинеарного режима. На основании полученных результатов производится численный расчет и моделирование процесса для кристалла BBO.

В ходе исследования были найдены угловые распределения вероятностей обнаружения фотонов в дальней зоне как в однофотонных измерениях, так и в схеме совпадений, в зависимости от положений детекторов, а также от угла наклона оптической оси. Будет продемонстрирована сильнейшая анизотропия процесса и обоснована необходимость учета эффектов второго порядка малости по угловым переменным.

- 1. Joobeur A. [et al.]. Coherence properties of entangled light beams generated by parametric downconversion: Theory and experiment //Physical Review A. 1996. V. 53. N 6. P. 4360.
- 2. *Kurtsiefer C., Oberparleiter M., Weinfurter H.* Generation of correlated photon pairs in type-II parametric down conversion—revisited //Journal of Modern Optics. 2001. V. 48. N 13. P. 1997–2007.
- 3. *Kim Y.H.* Quantum interference with beamlike type-II spontaneous parametric down-conversion //Physical Review A. 2003. V. 68. N 1. P. 013804.
- Fedorov M.V. [et al.]. Spontaneous parametric down-conversion: Anisotropical and anomalously strong narrowing of biphoton momentum correlation distributions //Physical Review A. 2008. V. 77. N 3. P. 032336.
- Fedorov M.V. Azimuthal entanglement and multichannel Schmidt-type decomposition of noncollinear biphotons //Physical Review A. 2016. V. 93. N 3. P. 033830.

УДК 530.145.1; 53.089; 519.25

Применение методов машинного обучения для предсказания динамики открытых квантовых систем в реальном эксперименте

А.А. Божедаров¹, И.А. Лучников^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Сколковский институт науки и технологий

Естественный способ описания динамики открытой квантовой системы [1] – считать эту динамику следствием взаимодействия интересующей нас системы (основной) и окружения. Полная квантовая система описывается гамильтонианом $H(t) = H_S \otimes I_B + I_S \otimes H_B + H_I(t)$, где H_S – гамильтониан основной системы, H_B – гамильтониан окружения, а H_I описывает взаимодействие основной системы и окружения. Приведенная матрица плотности $\rho_S(t)$ открытой квантовой системы в момент времени t получается из матрицы плотности $\rho(t)$ полной системы вычислением частичного следа по степеням свободы окружения, т.е. $\rho_S(t) = tr_B \{U(t,t_0)\rho(t)U^+(t,t_0)\}$, где $U(t,t_0)$ – оператор эволюции всей системы. В марковском приближении динамика открытой квантовой системы описывается с помощью уравнения Линдблада: $\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \mathcal{L}\rho_S(t)$, где \mathcal{L} – генератор Линдблада. Однако в реальном эксперименте динамика чаще всего немарковская, поэтому уравнение Линдблада применимо только к системам с короткой памятью, например оптическим.

В настоящее время начинают активно применять методы машинного обучения [2] для анализа квантовых систем. В докладе обсуждается альтернативный метод описания динамики открытой квантовой системы в реальном эксперименте, который базируется на методах машинного обучения.

В докладе будут представлены результаты тестирования метода на простейших примерах.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 16-11-00084) в Московском физико-техническом институте (государственном университете).

Литература

- 1. Бройер Х.-П., Петруччионе Ф. Теория открытых квантовых систем: Пер. с англ. под ред. Ю.И. Богданова. М. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2010. 824 с.
- Carleo G., Troyer M. Solving the Quantum Many-Body Problem with Artificial Neural Networks // Science. 2017. 355. 602.

УДК 530.145

Моделирование кубитов с помощью квантовых точек. Реализация вентиля Тоффоли, её устойчивость к классическим шумам

А.М. Магомедрасулов^{1,2}, Л.Е. Федичкин^{1,2,3}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Физико-технологический институт РАН ³НИКС, Москва, Россия

Изучается система трех двойных квантовых точек (ДКТ), как трех кубитов. Каждая ДКТ содержит один электрон. Относительное расположение ДКТ (или кубитов) приведено на рис. 1.

Производится компьютерное моделирование динамики (унитарной эволюции) системы для выполнения на ней квантовых вычислений. Базовым состояниям каждого кубита соответствуют состояния с локализацией электрона в одном из потенциальных минимумов (область темного цвета) соответствующей квантовой точки. ДКТ нумеруются слева направо. Динамика системы описывается гамильтонианом $\hat{H} = \sum \hat{H}_i + \hat{H}_{1,2}^I + \hat{H}_{3,2}^I$,

где $H_i = \frac{p_i}{2m} + V_i(\hat{r}_i)$ – гамильтониан изолированного (i-го) электрона в двойной квантовой яме, описываемой потенциалом $V_i(\vec{r}_i)$ (потенциал берется из статьи [1]), – гамильтониан взаимодействия двух (*i*-го и *j*-того) электронов (*e* - заряд электрона, *к* - диэлектрическая проницаемость материала).

Полагается, что температура окружения близка к абсолютному нулю, т. е. электрон в квантовой точке находится только на двух нижних уровнях энергии. В качестве приближения базисных состояний, возьмем состояния с следующим координатным представлением: $\phi_{i,k}(\vec{r}_i) = \frac{1}{a^{3/2}\pi^{3/4}} \exp\left(-\left(\vec{r}_i - \vec{R}_{i,k}\right)^2 / 2a^2\right)$ [2], где a – характерный размер ямы , $\vec{R}_{i,k}$ - положение центра потенциального минимума i-ой ДКТ соответствующего состоянию k соответствующего кубита.

Изучается реализация вентиля Тоффоли посредством кулоновского взаимодействия между электронами боковых (1-ой и 3-ей) ДКТ с электроном из центральной ДКТ. Исследуется устойчивость смоделированных вентилей к классическому прямоугольному шуму. В качестве меры зашумленности используется мера декогерентности, введенная в статье [3] и определяемая формулой $\rho(t) - \rho^{id}(t)_{\lambda}$, где $\rho(t), \rho^{id}(t)$ - матрицы плотности системы, вычисленные из зашумлённой и не зашумленной динамики соответственно, $\rho(0)$ - матрица плотности начального состояния.

$$CCNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \text{реализуемый вентиль Тоффоли.}$$



Рис. 1. Расположение двойных квантовых точек. Каждая квантовая точка выделена в синюю область; темным цветом обозначены области минимума потенциала.

- 1. *Fedichkin L., Yanchenko M., Valiev K.A.* Coherent charge qubits based on GaAs quantum dots with a built-in barrier // Nanotechnology 2000. V. 11. P. 387 391.
- Fedichkin L., Fedorov A. Study of temperature dependence of electron-phonon relaxation and dephasing in semiconductor double-dot nanostructures // IEEE Transactions on Nanotechnology 2005. V. 4. N. 1. P. 65 – 70.
- 3. *Fedichkin L., Fedorov A., Privman V.* Measures of decoherence // Proc. SPIE 2003. V. 5105. P. 243 254.

УДК 537.9

Материалы для однофотонного детектора микроволнового диапазона

В.Б. Лубсанов¹, Е.Р. Глушков¹, В.Л. Гуртовой^{1,2}, О.В. Астафьев^{1,3}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ² Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов ³ Royal Holloway University of London

Построение микроволновой фотоники на чипе – сложная и амбициозная задача, работа над которой ведётся в лабораториях по всему миру, причем, основными компонентами являются микроволновые однофотонные источники и детекторы. Достигнуты определенные успехи в разработке однофотонных источников [1], в то время как широкополосные однофотонные детектора еще не созданы.

Наша идея разрабатываемого детектора заключается в пороговом поглощении микроволновых фотонов с энергией hv, превышающей энергию связи куперовской пары в сверхпроводнике $2\Delta(T=0) = 3,52T_c$. Пороговым частотам излучения в диапазоне 5–50 ГГц соответствуют критические температуры сверхпроводника $T_c = (70-700)$ мК. Конструктивно такой детектор может представлять сверхпроводящий наномостик из материала с низкой критической температурой T_{c1} , встроенный в копланарную линию из сверхпроводника с $T_{c2} >> T_{c1}$. Главным достоинством такого детектора является большая рабочая полоса частот ($\approx 10-100$ ГГц), а также принципиально однофотонный режим работы. При попадании на наномостик детектируемых микроволновых фотонов, происходит разрушение куперовских пар, что при малом количестве пар в объеме наномостика может привести к существенному изменению кинетической индуктивности (L_k) и измеряемым эффектам в отражении тестирующего сигнала с частотой, меньшей $2\Delta/h$ наномостика. При технологически доступных размерах $100 \times 50 \times 10$ нм количество куперовских пар $N_{CP} \propto N_0 V \Delta \approx 70$, где $N_0 -$ плотность состояний, а V - объем наномостика. Чувствительность детектора обратно пропорциональна количеству пар $\delta L_k/L_k \propto 1/N_{CP}$.

При пороговой частоте 10 ГГц в качестве рабочего материала можно выбрать сверхпроводник с $T_c \approx 0.14$ K, например, иридий [2–4] или двухслойные материалы

сверхпроводник-нормальный металл, в которых T_c понижается из-за эффекта близости, например, Ti–Pt, Мо–Au и другие.

Работа по созданию однофотонного детектора микроволнового диапазона делится на два этапа, а именно, подбор рабочих материалов с нужной $T_c \approx 0,1 K$ и непосредственно изготовление детектора. Для реализации первого этапа была сделана серия образцов на сапфировой подложке с рабочими сверхпроводящими пленками: титан (35 нм), иридий (16 нм), молибден (12 нм)–золото (12 нм) и титан (20 нм)–платина (20 нм). Из этих пленок методом электронной литографии и плазменного травления формировались измерительные структуры с размерами мостиков шириной 2 мкм и 300 нм, каждый из которых имел длину в 10 раз больше ширины. Измерения в криостате растворения зависимостей R(T) для пленок представлены на рис. 1, 2. Пленки молибден (12 нм)–золото (12 нм) (рис. 1) имеют резкий сверхпроводящий переход с $T_c = 0,3$ К, то есть при больших толщинах золота возможно понижение сверхпроводящего перехода до 0,1 К. Пленки иридия (рис. 2) имели пониженную температуру перехода, ~ 30 мК, по сравнению с объемным материалом. Выяснилось, что после плазменного травления при формировании мостиков, в структурах, как правило, была подавлена сверхпроводимость вплоть до 20 мК, что говорит о высокой повреждающей чувствительности этих материалов к плазменным обработкам.

Чтобы избежать процессов плазменного травления, были изготовлены структуры методом взрывной электронной литографии. На рис. 3 представлены результаты измерений для мостиков титана (35 нм) шириной 300 нм и 2 мкм. Видно, что мостики титана переходят в сверхпроводящее состояние и могут быть использованы при изготовлении детекторов.

В докладе также будут представлены измерения для структур титан-платина с различными толщинами и результаты СВЧ-измерений детекторов.



Рис. 1. Зависимость сопротивления от температуры пленки молибден (12 нм)-золото (12 нм)



Рис. 2. Зависимость сопротивления от температуры пленки иридия толщиной 16 нм



Рис. 3. Зависимость сопротивления от температуры титана толщиной 35 нм для мостиков шириной 2 мкм и 300 нм

- 1. Peng Z.H., de Graaf S.E., Tsai J.S., and Astafiev O.V. Tuneable on-demand single-photon source in the microwave range // Nature Communications. 2016. 7. 12588.
- 2. Hein RA, Gibson JW, Matthias BT [et al.]. Superconductivity of iridium // Physical Review Letters. 1962. V. 8. N 10. P. 408.
- 3. Andres K, Jensen MA. Superconductivity, Susceptibility, and Specific Heat in the Noble Transition Elements and Alloys. I. Experimental Results // Physical Review. 1968. V. 165. N 2. P. 533.
- Raub Ch J. Superconductivity of the platinum metals and their alloys // Materials & design. 1984. V. 5. N 3. P. 129–136.

УДК 537.9

Комбинированный держатель образцов для измерений низкотемпературного электронного транспорта

В.Л. Гуртовой^{1,2}, В.Б. Лубсанов¹, Е.Р. Глушков¹, О.В. Астафьев^{1,3}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов ³ Roval Holloway University of London

Современные успехи в нанофабрикации позволяют формировать 3D, 2D и 1D нанообъекты с минимальными размерами 1–100 нм, которые, как правило, имеют квантованный энергетический спектр и являются «искусственными атомами». Уширение энергетических уровней определяется, с одной стороны, туннельными связями между нанообъектами и с измерительным «окружением», а с другой стороны, эффективной электронной температурой, дающей тепловое уширение. Поэтому энергетическое разрешение определяется как базовой температурой образца, так и неравновесным излучением, шумами и наводками от измерительного «окружения».

В данной работе ставилась задача создания держателя образцов с большим количеством DC линий (20 шт.) для измерения электронного транспорта в криостате растворения с рабочими температурами до 15 мК. Следует отметить, что для поддержания образцов в близких к равновесию условиях при базовой температуре (15 мК) требуется непосредственная защита от оптического, ИК- и микроволнового излучения, а также тщательная фильтрация DC-линий и CBЧ-вводов от неравновесного воздействия на образцы в широком частотном диапазоне.

На рис. 1а и б представлена модель держателя образцов, состоящего из трех элементов: крышки, тела держателя и катушки блока фильтрации, которые изготавливались из меди. На крышке крепится плата для фиксации образцов (рис. 1в) и разварки к двадцати контактным площадкам DC-линий, сгруппированных по десять сверху и снизу от образца (рис. 1в). Справа и слева к образцу подходят копланарные линии для

ввода и вывода СВЧ-излучения. Тело держателя состоит из двух полостей (рис.1 б): верхней, где на крышке находится образец (рис. 2а) и через две пары линейных разъемов осуществляется связь с десятью витыми парами, которые фильтруются на катушке блока фильтрации в нижней полости тела держателя. Блок фильтрации (рис. 2б) является компактным и эффективным низкотемпературным RC-фильтром [1], выполненным в виде десяти витых пар длиной 160 см, намотанных на медную катушку и покрытых серебряным клеем. Эффективность фильтрации была проверена на модельном фильтре из одной линии длиной 100 см, которая дает ослабление сигнала в диапазоне частот 1–10 ГГц более 80 дБ. Снаружи на верхней части тела держателя был намотан соленоид из сверхпроводящего провода, дающий магнитное поле 85 Гс/А.

Держатель образцов был протестирован в измерениях одиночного дзозефсоновского перехода с площадью 200 × 500 нм². Вольт-амперная характеристика перехода при температуре 30 мК представлена на рис. 3. Следует отметить, что из-за шумовых неравновесных токов измеренный критический ток джозефсоновских переходов редко достигает 50–60 % от предсказания по теории Амбегаокара–Баратова. Из ВАХ на рис. 3 следует, что критический ток перехода составляет 96% от теоретического, что демонстрирует высокую эффективность данной конструкции.



Рис. 1. Модель держателя образцов: а – общий вид, б – в разрезе. Плата для образца – в



Рис. 2. Изготовленные а – крышка в сборе с платой для образцов, б – фильтрационный блок для 10 витых пар



Рис. 3. Вольт-амперная характеристика джозефсоновского перехода с площадью 200 \times 500 ${\rm hm}^2$ при $T=30~{\rm mK}$

1. Christian P. Scheller C., Sarah Heizmann, Kristine Bedner, Dominic Giss, Matthias Meschke, Dominik M. Zumbühl, Jeramy D. Zimmerman, and Arthur C. Gossard Silver-epoxy microwave filters and thermalizers for millikelvin experiments // Applied Physics Letters. 2014. 104. 211106.

УДК 538.945

Улучшение добротности сверхпроводящих копланарных структур

В.Н. Мильчаков^{1,2}, Г.П. Федоров^{1,3}, И.Н. Храпач^{1,3}, В.И. Чичков⁴, Ю.И. Зотова³

¹ Российский квантовый центр ²Институт физики твердого тела РАН ³Московский физико-технический институт (государственный университет)

⁴Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Одними из самых перспективных кубитов многие исследователи [1] признают кубиты на основе сверхпроводящих структур. К положительным сторонам сверхпроводящих кубитов относятся их макроскопический размер, что значительно упрощает процесс манипулирования квантовыми состояниями системы и методику создания схем, состоящих из нескольких кубитов а также то, что параметры таких кубитов варьируются в широких пределах путем изменения их геометрических характеристик. Большим преимуществом является и то, что методика их изготовления во многом повторяет уже отточенный процесс изготовления современной микроэлектроники, а значит, полученные знания и созданные промышленные мощности могут быть без труда приспособлены для создания сверхпроводящих кубитов.

Одним из важнейших параметров кубита является время декогеренции. Естественно, для обработки и передачи квантовой информации её носители должны сохранять приготовленное состояние как можно дольше, и количество возможных операций над ними определяется именно временем их жизни. Причина декогеренции заключается во взаимодействии квантовой системы с ее окружением: внешними полями, двухуровневыми системами на подложке, проводами, подведенными для воздействия на кубит. От воздействия со стороны внешних шумов кубит можно защитить хорошим экранированием, а для снижения влияния двухуровневых систем необходимо предпринимать шаги по улучшению процесса фабрикации образца.

К настоящему времени научными группами по всему миру разработано множество видов кубитов, имеющих свои сильные и слабые стороны. К ряду кубитов, обеспечивающих сравнительно продолжительные времена когерентности – порядка 50 микросекунд [2] – относятся «трансмоны» [3] – зарядовые кубиты, шунтированные ёмкостью, а потому устойчивые к зарядовому шуму. Сейчас трансомны широко

используются как в целях разработки квантовых вычислителей, так и в фундаментальных исследованиях.

Гипотеза данного исследования состоит в том, что влияние двухуровневых систем на когерентность трансмона коррелирует с их влиянием на добротность копланарных сверхпроводящих резонаторов, а значит, измеряя сверхпроводящие резонаторы, можно подобрать оптимальный для создания кубитов процесс фабрикации.

Целью данного исследования является выяснение оптимальных параметров фабрикации, путем измерения добротностей резонаторов, приготовленных при разных условиях.

Изготовление сверхпроводящих структур – это многостадийный и тонкий процесс. Процесс делится на пять основных этапов: нанесение фоторезиста на подготовленную подложку, экспонирование структуры, проявление, напыление металла и удаление незасвеченного резиста вместе с остатками напыленного вещества. Соответственно, каждый из этих этапов может влиять на качество получаемых структур и поэтому должен быть тщательно отработан.

Для выяснения качества полученного резонатора проводится микроволновая спектроскопия образца. Частоты сверхпроводящих резонаторов обычно лежат в области 5-10 ГГц, что связано с тем что это частоты, характерные для сверхпроводящих кубитов, взаимолействие с которыми обычно и является конечной целью создания на чипе резонатора [4, 5]. Эксперимент проводится при сверхнизких температурах (10-30 мК), необходимых не только для перехода структур в сверхпроводящее состояние, но и во избежание воздействия тепловых шумов в исследуемом диапазоне частот. На один конец копланарной линии, расположенной на образце и проходящей вблизи концов нескольких копланарных резонаторов, рассчитанных на различные длинны волн, подается микроволновый сигнал. Сигнал проходит по линии и взаимодействует с резонаторами а затем усиливается и считывается векторным анализатором цепей, который учитывает разницу фаз и амплитуд поданного и прошедшего сигналов. При сканировании по частоте можно обнаружить провал в амплитуде и скачок фазы на частоте, соответствующей резонансной частоте резонатора, вызванный тем, что резонатор поглощает часть излучения. Проведя анализ полученных характеристик, включающих фазу и амплитуду прошедшего сигнала в зависимости от частоты сигнала и подаваемой мощности, можно выяснить внутреннюю добротность резонаторов, которая может являться показателем качества процесса фабрикации, что и было проделано в данной работе.

В результате проделанной работы добротности измеряемых резонаторов были увеличены с десятков тысяч до сотен, что привело в конечном итоге к улучшению качества изготавливаемых сверхпроводящих кубитов.



Рис. 1. Общий вид держателя образца с чипом, на котором изготовлено восемь сверхпроводящих резонаторов. Микроволновое излучение вводится через коннекторы, расположенные на противоположных сторонах от чипа



Рис. 2. Участок копланарного полуволнового резонатора на чипе. Один конец резонатора заземлен. Отверстия вокруг выполняют роль уловителей вихрей Абрикосова

- 1. Johnson M.W., Amin M.H.S., Gildert S., [et al.]. Quantum annealing with manufactured spins // Nature. 2011. V. 473. P. 194–198.
- 2. Barends R., Kelly J., Martinis John M. [et al.]. Coherent Josephson qubit suitable for scalable quantum integrated circuits // Physical Review Letters. 2013. V. 111.
- Koch J., Yu T., Gambetta J., [et al.]. Charge insensitive qubit design derived from the Cooper pair box // Physical Review A. 2007. V. 76.
- 4. Blais A., Wallraff A., Schoelkopf R.J. [et al.]. Cavity quantum electrodynamics for superconducting electrical circuits: An architecture for quantum computation. // Phys. Rev. 2004. A. 69 062320.
- 5. Braumuller J., Camer J., Schlor S., Ustinov A., [et al.]. Multy-photon dressing of an anharmonic superconducting many-level quantum circuit. // Phys. Rev. 2015. B. 91. 054523.
Секция нанооптики и спектроскопии

УДК 535.016

О взаимодействии Е-волны с тонким слоем невырожденной электронной плазмы

Н.В. Зверев, А.А. Юшканов

Московский государственный областной университет

В данной работе численно исследовано взаимодействие электромагнитных Е-волн с тонким плоским слоем толщиной d невырожденной электронной плазмы, расположенной между двумя прозрачными диэлектрическими средами с диэлектрическими проницаемостями ε_1 и ε_2 .

В настоящее время вследствие развития физики нанотехнологий большое внимание уделяется исследованиям температурной зависимости различных характеристик проводящих веществ [1]. В частности, большой интерес представляет изучение оптических величин веществ малых размеров с низкой электропроводностью, таких как полуметаллы, полупроводники и их соединения. Данные вещества моделируются невырожденной электронной плазмой, описываемой классическим распределением Максвелла. Однако изза малой толщины *d* слоя электронной плазмы необходимо учитывать как пространственные эффекты, так и квантовые волновые свойства плазмы.

Е-волна (вектор E волны лежит в плоскости падения) падает со стороны среды с ε_1 на поверхность электронной плазмы под углом θ . Энергетические коэффициенты отражения *R*, прохождения *T_r* и поглощения *A* электромагнитного излучения в тонком слое электронной плазмы имеют вид [2]:

$$R = \left| \frac{U^{(1)} + U^{(2)}}{V^{(1)} + V^{(2)}} \right|^2, \quad T_r = \operatorname{Re}\left(\frac{\cos\theta'}{\cos\theta} \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}} \right) \frac{U^{(1)}V^{(2)} - U^{(2)}V^{(1)}}{V^{(1)} + V^{(2)}} \right|^2, \quad A = 1 - R - T_r.$$
(1)

Здесь θ' – угол преломления в среду с ε_2 , а величины $U^{(j)}$ и $V^{(j)}$ имеют вид

$$U^{(j)} = \frac{\cos\theta - Z_E^{(j)}\sqrt{\varepsilon_1}}{\cos\theta' + Z_E^{(j)}\sqrt{\varepsilon_2}}, \qquad V^{(j)} = \frac{\cos\theta + Z_E^{(j)}\sqrt{\varepsilon_1}}{\cos\theta' + Z_E^{(j)}\sqrt{\varepsilon_2}}.$$
(2)

В этой формуле $Z_E^{(j)}$ (j = 1, 2) – импедансы Е-волны на поверхности слоя плазмы, вычисленные в работе [3] для случая зеркального отражения электронов от поверхности плазмы:

$$Z_{E}^{(j)} = \frac{2ic\omega}{d} \sum_{n} \frac{1}{k_{n}^{2}} \left(\frac{k_{x}^{2}}{\omega^{2} \varepsilon_{l}(\omega, k_{n})} + \frac{(\pi n/d)^{2}}{\omega^{2} \varepsilon_{tr}(\omega, k_{n}) - (ck_{n})^{2}} \right).$$
(3)

Здесь ω – частота излучения, c – скорость света, ε_l и ε_{tr} – продольная и поперечная диэлектрические проницаемости электронной плазмы. Далее, суммирование ведется по всем нечетным $n = \pm 1, \pm 3, \pm 5,...$ при j = 1 и по всем четным $n = 0, \pm 2, \pm 4,...$ при j = 2, а величины

$$k_n = \sqrt{\left(\frac{\pi n}{d}\right)^2 + k_x^2}, \qquad k_x = \frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_1}\sin\theta.$$
 (4)

Для исследований взяты проницаемости квантовой невырожденной электронной плазмы с постоянной частотой столкновений, найденные в работах [4, 5]:

$$\varepsilon_l^{(qn)}(\omega,k) = 1 - \frac{2}{Q^2} \frac{(\Omega + i\gamma)G(\Omega + i\gamma, Q)G(0,Q)}{\Omega G(0,Q) + i\gamma G(\Omega + i\gamma, Q)},$$
(5)

$$\varepsilon_{tr}^{(qn)}(\omega,k) = 1 - \frac{1}{\Omega^2} \left(1 + \frac{\Omega G(\Omega + i\gamma, Q) + i\gamma G(0,Q)}{\Omega + i\gamma} \right),\tag{6}$$

где

$$G(\Omega + i\gamma, Q) = \frac{Q^2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{[(\Omega_+ + i\gamma)(\Omega_- + i\gamma) + (Q\xi)^2]\exp(-\xi^2)}{[(\Omega_+ + i\gamma)^2 - (Q\xi)^2][(\Omega_- + i\gamma)^2 - (Q\xi)^2]} d\xi,$$
(7)

$$\Omega = \frac{\omega}{\omega_p}, \quad \Omega_{\pm} = \Omega \pm \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m_e \omega_p} k^2, \quad \gamma = \frac{1}{\omega_p \tau}, \quad Q = k \sqrt{\frac{2k_B T}{m_e \omega_p^2}}.$$
(8)

Здесь ω_p — плазменная частота электронной плазмы, τ — время релаксации электронов из-за их столкновений в плазме, m_e — эффективная масса электронов проводимости, \hbar — постоянная Планка, k_B — постоянная Больцмана, T — температура электронной плазмы.

Полученные результаты сравниваются с данными, найденными для проницаемостей классической невырожденной электронной плазмы $\varepsilon_l^{(\tilde{n}n)}(\omega,k)$ и $\varepsilon_{lr}^{(\tilde{n}n)}(\omega,k)$ [4, 5], а также для проницаемостей классического электронного газа в подходе Друде–Лоренца [2]:

$$\varepsilon_l^{(DL)}(\omega) = \varepsilon_{tr}^{(DL)}(\omega) = 1 - \frac{1}{\Omega(\Omega + i\gamma)}$$

Проницаемости классической невырожденной электронной плазмы получаются из (5) и (6) при $\hbar \to 0$, а проницаемости классического электронного газа – при $k \to 0$.

Результаты численных расчётов коэффициентов R, T_r и A квантовой невырожденной электронной плазмы по формулам (1) – (8) с параметрами, взятыми для графита [6], показывают, что для частот $\omega \sim \omega_p$ и $\omega > \omega_p$ рассматриваемые энергетические коэффициенты отличаются от этих коэффициентов, вычисленных в рамках подходов классической электронной плазмы и классического электронного газа (рис. 1). Также для этих частот имеет место температурная зависимость данных коэффициентов.





Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ МК-7359-2016-9, а также грантов РФФИ № 14-07-90009 Бел_а и № 14-47-03608 р_центр_а.

Литература

1. *Faramarzi Sh., Hervieuxa P.-A. and Bigota J.-Y.* Temperature dependence of longitudinal and transverse dielectric functions of inhomogeneous Fermi systems in the local density approximation // J. of Optoelectr. and Adv. Mater. 2005. V. 7. N 6. P. 3083.

- 2. Yushkanov A.A. and Zverev N.V. Quantum Electron Plasma, Visible and Ultraviolet P-wave and Thin Metallic Film // Phys. Lett. A. 2017. V. 381. P. 679.
- 3. *Kliewer K.L. and Fuchs R.* Anomalous Skin Effect for Specular Electron Scattering and Optical Experiments at Non-Normal Angles of Incidence // Phys. Rev. 1968. V. 172. N 3. P. 607.
- 4. Латышев А.В., Юшканов А.А. Поперечная электрическая проводимость квантовой столкновительной плазмы в подходе Мермина // Теор. и Матем. Физ. 2013. Т. 175. № 1. С. 132.
- 5. *Латышев А.В., Юшканов А.А.* Продольная электрическая проводимость в квантовой плазме с переменной частотой столкновений в рамках подхода Мермина // Теор. и Матем. Физ. 2014. Т. 178. № 1. С. 147.
- 6. Бабичев А.П., Бабушкина Н.А., Братковский А.М. [и др.]. Физические величины: Справочник / под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.

УДК 535.015

Гибридный плазмонный нанолазер

П.Н. Мелентьев¹, А.С. Гритченко^{1,2}, А.С. Калмыков^{1,3}, А.Е. Афанасьев¹, В.И. Балыкин¹, А.С. Бабурин⁴, Е.В. Рыжова⁴, И.А. Филиппов⁴, И.А. Родионов⁴, И.А. Нечепуренко^{2,5}, А.В. Дорофеенко^{2,5}, И.А. Рыжиков^{2,5}, А.П. Виноградов^{2,5}

¹ Институт спектроскопии РАН

² Московский физико-технический институт (государственный университет)

³ Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

⁴ Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

⁵ Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Создание плазмонного нанолазера является одним из наиболее актуальных направлений развития квантовой наноплазмоники. Решение этой задачи является принципиально важной, поскольку представляет новый подход к миниатюризации лазеров. Поля, вызванные поверхностными плазмонами, экспоненциально затухают от границы раздела, что позволяет концентрировать свет на размерах меньше дифракционного предела. Соответственно электромагнитные эффекты, вызываемые этими полями, происходят в суб-волновой области вблизи поверхностей.

Плазмонный нанолазер является наноразмерным (хотя бы в одном измерении) квантовым генератором наноразмерных когерентных оптических полей. Идея плазмонного лазера была впервые выдвинута Сударкиным и Демковичем [1]. Теоретическое обоснование возможности создания спазера было дано Штокманом и Бергманом в работе [2]. Идея спазера получило дальнейшее развитие в теоретических работах [3]. Первая экспериментальная демонстрация плазмонного лазера была осуществлена в работе Ногинова с соавторами [4].

Существует два принципиально разных подхода в создании резонатора плазмонного нанолазера: (1) использование металлических наноструктур, (2) использование нано-структурированных металлических наноплёнок. Использование металлических наноплёнок, структурированных с помощью сквозных наноотверстий, обладает рядом преимуществ: (1) устойчивостью к высоким интенсивностям лазерного излучения, (2) возможностью сильного ослабления света от лазера-накачки, (3) направленностью генерации излучения. Продемонстрирован ряд работ, убедительно показывающих возможность создания плазмонных нанолазеров с резонатором в виде сквозных наноотверстий изготовленных в плёнке серебра [5].

В настоящей работе исследована генерация излучения от плазмонного нанолазера на длине волны 630 нм, резонатор которого образован матрицей наноотверстий изготовленных в плёнке серебра (резонатор с распределённой обратной связью). Резонатор нанолазера имеет низкие потери, около 40 см⁻¹, обусловленные тремя факторами: (1) ультравысокое качество использованной наноплёнки серебра, (2) гибридная фотонплазмонная мода нанолазера, (3) генерация с возбуждением «тёмной» плазмонной моды. Показана генерация когерентного излучения с шириной линии около 2 нм и направленностью около 1,5°.

Литература

- 1. Sudarkin A. N., Demkovich P. A. Excitation of surface electromagnetic waves on the boundary of a metal with an amplifying medium//Sov. Phys. Tech. Phys. 1988. V. 34. P. 764.
- Bergman D. J. and Stockman M. I. Surface plasmon amplification by stimulated emission of radiation: Quantum generation of coherent surface plasmons in nanosystems// Phys. Rev. Lett. 2003. V. 90. P. 027402–1–4.
- 3. *Stockman M.I.* The spaser as a nanoscale quantum generator and ultrafast amplifier//Journal of Optics. 2010. V. 12. P. 024004–1–13.
- Noginov M.A., Zhu G., Belgrave A.M., Bakker R., Shalaev V.M., Narimanov E.E., Stout S., Herz E., Suteewong T., and Wiesner U. Demonstration of a spaser-based nanolaser // Nature. 2009. V. 460. P. 1110–1112.
- 5. *Meng X., Liu J., Kildishev A.V., and Shalaev V.M.* Highly directional spaser array for the red wavelength region // Laser Photonics Rev. 2014. V. 8. P. 896.

УДК 535.345

Оптические свойства поглотителей ИК-излучения на основе слоистой структуры диэлектрик-металл-диэлектрик-металл

B.M.Губарев¹, B.B.Medsedes^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт спектроскопии РАН

Тонкие металлические пленки широко используются в качестве ключевых компонентов поглощающих структур электромагнитного излучения. Однако изученные ранее слоистые структуры имеют ряд существенных недостатков. Во-первых, для полного поглощения излучения необходимо выбирать материалы с относительно высоким удельным сопротивлением (Ti, Nb). Во-вторых, механические повреждения и (или) окисление входного металлического слоя существенно снижают эффективность поглотителя. В данной работе предлагается новая модель поглощающей структуры (диэлектрик-металл-диэлектрик-металл), позволяющая решить вышеуказанные проблемы.

Исследуемая система схематически показана на рис. 1. Она состоит из двух диэлектрических материалов с показателями преломления n_1 и n_2 , разделенных тонкой металлической пленкой толщиной d и удельной проводимостью σ . Система находится на идеальном отражателе, таком, что излучение в него не проникает. Используя приближение интерференции парциальных волн, можно получить уравнение, описывающее коэффициент амплитудного отражения для падающей плоской волны:

$$r = [r_{01} + r_{123} \exp(4i\pi\delta_1)] / [1 - r_{10}r_{123} \exp(4i\pi\delta_1)],$$
(1)

где r_{123} отвечает за интерференцию в нижнем непоглощающем слое рассматриваемой структуры и определяется выражением:

$$r_{123} = r_{12} + t_{12}t_{21}r_{23}\exp(4i\pi\delta_2)/[1 - r_{21}r_{23}\exp(4i\pi\delta_2)], \qquad (2)$$

где $\delta_2 = n_2 d_2 / \lambda$, $\lambda -$ длина волны падающего излучения.

Входящие в формулы (1), (2) r_{01} , r_{10} , t_{12} , t_{21} являются амплитудными коэффициентами отражения и пропускания Френеля и даются формулами

$$\mathbf{r}_{01} = [\mathbf{n}_0 - \mathbf{n}_1] / [\mathbf{n}_0 + \mathbf{n}_1], \tag{3}$$

$$\mathbf{r}_{10} = -\mathbf{r}_{01},\tag{4}$$

$$t_{12} = 2n_1 / [n_1 + n_2 + y], \tag{5}$$

$$t_{21} = 2n_2/[n_1 + n_2 + y], \tag{6}$$

где параметр *y* [1] определяется удельной проводимостью σ и толщиной *d* металлической пленки следующим образом:

$$\mathbf{y} = \sigma d / \varepsilon_0 c \tag{7}$$

Коэффициент r_{23} в уравнении (2) обозначает коэффициент Френеля для интерфейса между нижним диэлектрическим слоем и металлическим отражателем. Для простоты последующего анализа положим $r_{23} = -1$, что соответствует идеальному отражению на этом интерфейсе.

Условие полного поглощения рассматриваемой структуры эквивалентно условию нулевого отражения. В общем случае уравнение r = 0 не имеет аналитического решения, поэтому используем численный метод Нельдера–Мида [2]. В случае $n_1 = n_2 = n$ результаты минимизации коэффициента отражения по параметрам системы δ_2 , у для различных значений показателей преломления слоев в диапазоне $\delta_2 = [0,0; 0,5]$ представлены на рис. 2. Примечательны наличие точки симметрии $n_2d_2/\lambda = n_1d_1/\lambda = 0,25$ и квадратичная зависимость максимума параметра металлической пленки у от показателя преломления *n* верхнего диэлектрического слоя.



Рис. 1. Слоистая структура диэлектрик-металл-диэлектрик-металл



Рис. 2. Рассчитанные значения nd_2/λ (слева) и **у** (справа), обеспечивающие нулевое отражение для различных значений показателей преломления слоёв системы

Литература

- 1. McKnight S.W., Stewart K.P., Drew H.D. and Moorjani K. Wavelength-independent anti-interference coating for the far-infrared // Infrared Phys. 1987. P. 327–333.
- 2. Nelder J.A., Mead R. // Computer Journal. 1965. V. 7. P. 308–313.

Оптические и спиновые свойства NV-центров в агрегатах детонационных алмазов

А.И. Зеленеев^{1,2}, С.В. Большедворский^{1,3,4}, В.В. Воробьев^{1,3,4}, В.В. Сошенко^{1,3,4}, В.Н. Сорокин^{2,3}, А.В. Акимов^{2,3,5}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Russian Quantum Center ³Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН ⁴Photonic Nano-Meta Technologies ⁵Texas A&M University

В настоящее время центры окраски в алмазе привлекают много внимания исследователей из области квантовой оптики. Так, NV-(Nitrogen-Vacancy) центры окраски в алмазе активно исследуются как ключевой элемент обработки квантовой информации [1], а также имеют приложение в качестве сенсоров магнитных и электрических полей [2, 3]. Одно из направлений исследований в настоящее время – это работы по поиску оптически активных центров окраски и исследованию их оптических свойств в наноалмазах [4]. Интерес к наноалмазам определяется прежде всего сенсорными приложениями, в которых наноалмаз может играть роль чувствительного элемента сенсора. Кроме того, наноалмазы могут служить естественными однофотонными источниками, излучение которых может быть собрано и усилено за счет, например, взаимодействия с метаматериалами, плазмонными или диэлектрическими стркутурами и резонаторами [5].

В нашей работе мы исследуем оптические и спиновые свойства одиночных NVцентров окраски в алмазе, содержащихся в агрегатах детонационных наноалмазов (ДНА). Агрегат состоит из наноалмазов размерами 2–5 нм (рис. 1а). Размер агрегата может достигать до 100 нм. Вероятность формирования NV-центра в ДНА крайне мала (меньше 1% [6]), поэтому часто агрегат ДНА содержит одиночный NV-центр. Это позволяет нам эффективно исследовать оптические и спиновые свойства NV-центров в агрегатах ДНА. Для того чтобы убедиться, что мы работаем с одиночными NV-центрами, мы измеряли корреляционную функцию второго порядка (рис. 16).

Оптические свойства NV-центров в ДНА интересны, поскольку NV-центры в агрегатах ДНА ярче из-за низкого эффективного показателя преломления агрегата по сравнению с кристаллическими наноалмазами, что позволяет собирать в 2,2 раза больше фотонов по сравнению с кристаллическими наноалмазами того же размера. Сенсорные приложения, однако, как и приложения обработки квантовой информации также крайне чувствительны к спиновым свойствам NV-центров. Поэтому было проведено детальное исследование спиновых свойств электронной системы NV-центров. Измерение спиновых свойств проводилось в два этапа: сначала детектировался оптически детектируемый магнитный резонанс (ОДМР) во внешнем магнитном поле (рис. 2a), по которому определялась рабочая частота микроволнового поля, а также подтверждалась идентификация NV-центров. Затем на измеренной частоте регистрировались Раби осцилляции электронного спина NV-центра (рис. 2б), затухание которых позволяло судить о времени когерентности электронного спина. Измерение частоты Раби позволяло также использовать эхо-последовательность для определения полного времени когерентности. В наших измерениях время когерентности электронного спина составило 3-5 мкс, что не уступает значениям, полученным для кристаллических наноалмазов схожего размера [7]. Таким образом, яркие и дешевые агрегаты могут стать превосходной заменой большим наноалмазам в сенсорных приложениях (магнитометрия и термометрия), в частности в биологии, благодаря своей нетоксичности [8]. Кроме того, разумные результаты спиновых свойств агрегатов ДНА указывают на потенциально хорошие спиновые свойства у самих детонационных наноалмазов, что открывает возможность использования ДНА в нанофотонных приложениях [9].



2800 2875. 2950 0 1000. 2000 *Частота, МГц* Время, нс Рис. 2. а – Расщепление ОДМР во внешнем магнитном поле; б – Раби осцилляции электронного

Рис. 2. а – Расщепление ОДМР во внешнем магнитном поле; 6 – Раби осцилляции электронного спина NV центра под микроволновым возбуждением 2822 МГц

- 1. Doherty M. W., Manson N. B., Delaney P., Jelezko F., Wrachtrup J., Hollenberg L. C. L., The nitrogenvacancy colour centre in diamond // Phys. Rep. 2013. V. 528. P. 1–45.
- Dolde F., Fedder H., Doherty M. W., Nöbauer T., [et. al.]. Electric-field sensing using single diamond spins // Nat. Phys. 2011. V. 7. P. 459–463.
- Maze J. R., Stanwix P. L., Hodges J. S., Hong S., Lukin M., [et. al.]. Nanoscale magnetic sensing with an individual electronic spin in diamond // Nature. 2008. V. 455. P. 644–647.
- Vlasov I., [et. al.]. Molecular-sized fluorescent nanodiamonds // Nature nanotechnology. 2013. V. 9. P. 54–58.
- 5. Shalaginov M., [et. al.]. Enhancement of single-photon emission from nitrogen-vacancy centers with TiN/(Al,Sc)N hyperbolic metamaterial // Laser & Photonics Reviews. 2014. V. 9. P. 120–127.
- 6. Bradac C., [et. al.]. Observation and control of blinking nitrogen-vacancy centers in discrete nanodiamonds // Nature nanotechnology. 2010. V. 5. P. 345–349.
- 7. Rabeau J. R., [et. al.]. Single Nitrogen Vacancy Centers in Chemical Vapor Deposited Diamond Nanocrystals // Nano Lett. 2007. V. 7. P. 3433–3437.
- Schirhagl R., Chang K., Loretz M., Degen C. L., Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond: Nanoscale Sensors for Physics and Biology // Annu. Rev. Phys. Chem. 2014. V. 65. P. 83–105.
- 9. *Vorobyov V. V.*, [*et. al.*]. Coupling of single NV center to adiabatically tapered single mode fiber // Eur. Phys. J. D. 2016. V. 70. 269.

Исследование фононного крыла фотолюминесценции комплекса германий–вакансия под давлением.

А.А. Разгулов^{1,2}, С.Г Ляпин², А.П. Новиков², Е.А. Екимов²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт физики высоких давлений им. Верещагина РАН

На протяжении последних нескольких лет оптические свойства центров окраски в алмазе являются предметом исследований большого количества научных групп по всему миру. Во многом это связано с возможными практическими применениями алмазов, содержащих подобные центры. Среди таких перспективных применений можно отметить использование в качестве маркеров в биологии и медицине, в качестве однофотонного излучателя в квантовых сетях обработки и передачи информации или же применение алмазов, содержащих центры окраски, для повышения разрешения в наноразмерной микроскопии [1].

Несмотря на впечатляющие возможности практического применения, физические процессы, отвечающие за оптические свойства центров окраски в алмазах, остаются не до конца изученными. В этой связи экспериментальное исследование влияния внешнего гидростатического давления на фотолюминесценцию центров окраски предоставляет возможность проверки уже существующих теоретических моделей. Ранее нашей группой были опубликованы результаты исследований влияния внешнего давления на бесфононные линии (БФЛ) центров GeV⁻ (германий–вакансия), NV⁰ (азот вакансия), NV⁻ и SiV⁻ (кремний-вакансия) [2, 3]. В настоящей работе представлены результаты исследований влияния гидростатического давления на пики фононного крыла GeV⁻ центра.

В данной работе была исследована фотолюминесценция микроразмерных алмазов, содержащих GeV-центры. Образцы были выращены HPHT-методом из смеси нафталина (С10H8, 99% 12C) и германия с природным изотопическим составом [4]. Образцы были помещены в камеру высокого давления с алмазными наковальнями, которая, в свою очередь, помещалась в криостат. В качестве среды, передающей давление, использовался гелий. Измерения проводились при температуре 80 К, давление в эксперименте менялось в пределах от атмосферного до ~ 6 ГПа.

На рис. 1а представлена эволюция пиков фононного крыла от давления для GeV центра. Пики L_1 и L_1^* соответствуют переходам с нулевого колебательного уровня возбужденного состояния на первый колебательный уровень основного состояния (рис. 1 б) и представляют собой локальные колебательные моды (ЛКМ) [4]. Происхождение пика L₂ в настоящий момент является предметом дискуссий: предполагается, что этот пик соответствует переходу с нулевого колебательного уровня возбуждённого состояния на второй колебательный уровень основного состояния [5], однако для окончательной идентификации требуются дополнительные исследования. Пик Р обусловлен фононной модой алмазной решетки. Пик, обозначенный как NV⁻, является БФЛ люминесценции NV⁻ центра. В рамках настоящей работы были получены барические зависимости всех пиков фононного крыла, которые являются линейными в диапазоне давлений, достигнутых в эксперименте. Так же было показано, что промежуток между БФЛ и пиком L₁, равный энергии локального фонона, увеличивается при увеличении давления. Стоит отметить, что этот результат отличается от результатов аналогичных экспериментальных исследований, проведенных для NV-центра [6], однако теоретические расчеты, выполненные для этого центра, так же демонстрируют зависимость энергии локального фонона от давления [7]. Наконец, была построена зависимость параметра Хуана–Риса $S = -\ln(I_{Б\Phi\Pi}/(I_{Б\Phi\Pi} + I_{\Phi K}))$ от давления, где $I_{Б\Phi\Pi}$ – интегральная интенсивность бесфононной линии, а $I_{\Phi K}$ – интегральная интенсивность фононного крыла. Обнаружено, что S уменьшается при увеличении давления, что свидетельствует об уменьшении электрон-фононного взаимодействия при увеличении давления.



Рис. 2. А – Эволюция положений пиков фононного крыла при увеличении давления, б – схема электронных переходов в рамках модели Хуана–Риса

- Aharonovich I., Greentree A.D., and Prawer S. Diamond photonics // Nature Photonics. 2011. V. 5. P. 397–405.
- Разгулов А.А., Ляпин С.Г., Новиков А.П., апd Екимов Е.А. Исследование фотолюминесценции алмазов, содержащих комплексы германий-вакансия, под давлением // Труды 59-й конференции МФТИ - Всероссийской научной конференции «Актуальные проблемы фундаментальных и прикладных наук в области физики». 2016. Москва, Россия.
- 3. *Lyapin S.G., Ilichev I.D., Novikov A.P., Davydov V.A., and Agafonov V.N.* Study of optical properties of the NV and SiV centers in diamond at high pressures // Book of Abstracts, 13th International Conference «Advanced Carbon Nanostructures». 2017. St. Petersburg, Russia.
- Ekimov E.A., Lyapin S.G., Boldyrev K.N., Kondrin M.V., Khmelnitskiy R., Gavva V.A., Kotereva T.V., and Popova M.N. Germanium-vacancy color center in isotopically enriched diamonds synthesized at high pressures // JETP Letters. 2015. V. 102. P. 701–706.
- Ekimov E.A., Krivobok V.S., Lyapin S.G., Sherin P.S., Gavva V.A., and Kondrin M.V. Anharmonicity effects in impurity-vacancy centers in diamond revealed by isotopic shifts and optical measurements // Physical Review B. 2017. V. 95. P. 094113.
- Kobayashi M. and Nisida Y. High-Pressure Effects on Photoluminescence Spectra of Color-Centers in Diamond // Jpn. J. Appl. Phys. 1993. V. 32. Supplement 32–1. P. 279–281.
- 7. Deng B., Zhang R.Q., and Shi X.Q. New insight into the spin-conserving excitation of the negatively charged nitrogen-vacancy center in diamond // Sci Rep. 2014. V. 4. P. 5144.

Лазерно-индуцированная фрагментация жидкометаллических капель

Б.В. Лакатош¹, М.С. Кривокорытов^{2,3}, В.В. Медведев², В.М. Кривцун^{2,4}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Институт спектроскопии РАН ³EUV Labs

⁴RnD-ISAN

Лазерное воздействие на мишень может привести к возбуждению в ней ударной волны. Такие ударные волны широко используются для изучения разрыва и фрагментации конденсированных сред. Соответствующие эксперименты проводились для различных веществ и параметров лазерного излучения. Однако в случае мишеней из жидкого материала лазерно-индуцированные ударные волны изучались преимущественно в оптически прозрачных средах, а именно: вода или глицерин. Такая селективность в выборе материала для мишени объясняется возможностью прямого наблюдения изучаемого эффекта и тем, что при комнатных температурах данные материалы уже находятся в жидком состоянии.

Типичной мишенью для изучения лазерно-индуцированной ударной волны в жидкой среде является капля. В случае фокусировки лазерного излучения в водяную или глицериновую каплю, поглощение лазерной энергии происходит в объеме мишени. Что ведет к испарению вещества внутри капли и индуцированию соответствующей сферической ударной волны. В случае же жидких металлических капель, лазерная энергия поглощается в тонком поверхностном слое, реализуясь в его абляции и воздействию импульса абляционного давления снаружи мишени. Таким образом, морфология индуцированных ударных волн в металлических и оптически прозрачных средах различны, что ведет к различным результатам в фрагментации мишеней.

Интерес к изучению фрагментации жидкометаллических капель под действием лазерного излучения также обусловлен практическим использованием данного эффекта в плазменных источниках света в экстремальной ультрафиолетовой литографии.

УДК 538.941

Простые волны в двухкомпонентном конденсате Бозе-Эйнштейна

С.К. Иванов, А.М. Камчатнов

Московский физико-технический институт (государственный университет) Институт спектроскопии РАН

Изучение многокомпонентных нелинейных волн является одной из важных тем, которая имеет потенциальные приложения для конденсатов Бозе–Эйнштейна в атомной физике [1] и оптических волокон в нелинейной оптике [2]. Динамика конденсата значительно усложняется при переходе от однокомпонентного к двухкомпонентному газу, где конденсируются атомы двух разных видов, двух разных изотопов одного вида атомов или один вид атомов в двух различных квантовых состояниях, таких, что разность энергетических уровней этих состояний намного меньше температуры конденсата. В частности, появляются два типа движения: «волны плотности» с синфазным движением двух компонент и «поляризационные волны» с противофазным движением компонент. Было замечено (см. [3]), что динамику поляризации можно отделить от динамики волн плотности даже для случая волн большой амплитуды, если разница между константами внутри- и межкомпонентного взаимодействия мала. В этом случае структуры, возникающие в процессе эволюции в двухкомпонентном конденсате, были изучены в предположении, что полная плотность сохраняется. Для этих целей была исследована задача, где рассматривается эволюция начального разрыва. Противоположная проблема,

когда взаимодействие между конденсатами относительно мало, изучалась очень мало. Кроме того, в двухкомпонентных системах стоит различать случай несмешивающегося конденсата, где взаимное отталкивание компонент относительно велико.

В этом докладе рассматривается динамика простых волн, образовавшихся в Бозе–Эйнштейна, смешивающихся двухкомпонентных конденсатах не налагая ограничений на относительное взаимодействие компонент. Получены дифференциальные уравнения, описывающие эволюцию плотности и скорости потока компонент конденсата для простых волн. Приближенные решения будут найдены для случая, когда плотность одной из компонент намного больше плотности другого компонента. Эти результаты будут применены к задаче об эволюции начального разрыва с расширением в вакуум для двух характерных случаев. Будет показано, что когда компоненты отталкиваются относительно сильно, общая плотность остается постоянной. Для ситуации слабого взаимодействия между компонентами конденсата интересной особенностью является возможность образования составных простых волн. Такие структуры состоят из волны разрежения, сформированной без действия одной компоненты на другую, и волны разрежения, сформированной под влиянием второй компоненты. Теория, развитая в этой работе, хорошо согласуется с численными результатами.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 16-01-00398.

Литература

- 1. Kevrekidis P.G., Frantzeskakis D.J., and Carretero-Gonzalez R. Emergent nonlinear phenomena in Bose-Einstein condensates. Berlin: Springer-Verlag, 2008.
- 2. *Kivshar Yu.S. and Agrawal G.P.* Optical solitons: From fibers to photoic crystals. San Diego: Academic Press, 2003.
- 3. *Qu C., Pitaevskii L.P., and Stringari S.* Magnetic Solitons in a Binary Bose-Einstein Condensate // Phys. Rev. Lett. 2016. 116. 160402.

УДК 544.653.23

Тонкие пленки анодного оксида титана для фотонных кристаллов

Г.А. Ермолаев¹, Н.А. Саполетова², С.Е. Кушнир², К.С. Напольский²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Распространение света в средах с периодически изменяющейся диэлектрической проницаемостью в настоящее время вызывает большой интерес среди исследователей благодаря наличию аналогий с другими явлениями в твердом теле. Например, фотонная запрещенная зона в фотонных кристаллах является аналогом электронной запрещенной зоны в кристаллических структурах. Свойства фотонных кристаллов определяются как показателями преломления составляющих элементов, так и характером их расположения. Фотонные кристаллы обычно классифицируют по последнему параметру, выделяя три основных типа: одномерные, двухмерные и трехмерные. Одномерными фотонными кристаллами являются многослойные пленки с чередованием показателей преломления в слоях [1].

Существует много методов создания одномерных фотонных кристаллов, включая осаждение под скользящим углом, послойное осаждение и золь-гель метод. Однако данные методы обладают рядом недостатков, таких как высокая стоимость оборудования, дефектность получаемой структуры и сложность исполнения. С другой стороны, для получения фотонно-кристаллических структур можно использовать совсем другой подход: проводить анодирование металла, сопровождающееся его окислением и, как следствие, образованием оксидной пленки, при периодически изменяющемся во времени напряжении/токе. Данная технология удобна в применении и экономически наиболее выгодна, что делает ее привлекательной и популярной среди исследователей [2]. Сейчас для анодирования широко используют кремний, алюминий и титан. Материалы, получаемые в результате анодирования кремния, непрозрачны в видимом диапазоне. Получаемый при анодировании алюминия оксид обладает сравнительно низким показателем преломления в видимом диапазоне длин волн: n = 1,7. В то же время оксид титана обладает значительно более высоким показателем преломления (2,7 для TiO₂), что особенно важно для формирования качественного фотонного кристалла [3]. Для направленного формирования фотонных кристаллов путём анодирования титана необходимы данные о влиянии напряжения анодирования на эффективный показатель преломления и толщину формирующегося слоя анодного оксида титана.

В настоящей работе исследованы тонкие пленки анодного оксида титана. Структуры получены анодированием титановой фольги (чистота 99,6%) в электролите, содержащем 0.081 M NH₄F и 1.11 М воды в этиленгликоле, при комнатной температуре, с перемешиванием 150 об/мин, при суммарном протекшем заряде 2,5 Кл. Перед анодированием фольга была предварительно обработана: сначала химическое травление в водном растворе (5,92 M HNO₃; 0,9 M HF) в течение 30 минут, затем анодирование при напряжении 85 В в этиленгликоле, содержащем 0,1 М NH₄F и 5,56 М воды, с последующим удалением оксидной пленки. Оксидные пленки на поверхности титана были получены при напряжениях 10-60 В с шагом в 10 В. Были измерены спектры отражения полученных структур на спектрофотометре Lambda 950 (Perkin Elmer) при разных углах падения (8°, 30°, 45°, 60°, 68° относительно нормали к поверхности пленки). В спектрах хорошо видны осцилляции Фабри-Перо (пример спектра представлен на рис. 1), по положению максимумов которых, с использованием уравнения Брегга-Снелла (1) (d - толщина образца; $n_{\rm eff}$ – эффективный показатель преломления среды; m – порядок интерференции; λ длина волны), определены толщины и эффективные показатели преломления тонких пленок, полученных при различных напряжениях.

$$2d\sqrt{n_{eff}^2 - \sin^2\theta} = m\lambda.$$
 (1)

Из данных, приведенных в табл. 1, видно, что чем больше прикладываемое напряжение, тем больше показатель преломления и, как следствие, меньше пористость структуры.

Полученные данные о зависимости эффективного показателя преломления пористых плёнок анодного оксида титата от напряжения будут использованы при дальнейшем формировании одномерных фотонных кристаллов путем анодирования титана при периодически изменяющемся напряжении от плотности заряда.



Рис. 3. Осцилляции Фабри–Перо в спектре отражения пористой пленки анодного оксида титана, полученной при 60 В при протекшем заряде 2,5 Кл, на титановой подложке (измерение при 8° по отношению к нормали к поверхности образца)

Таблица 1

Толщина, отношение толщины к удельному заряду и эффективный показатель преломления пленок анодного оксида титана, полученных при различных напряжениях

Напряжение, В	Толщина пленки, нм	Отношение	Эффективный
		толщины	показатель
		пленки к	преломления
		удельному	при длине
		заряду,	волны 1100
		нм·см ² ·Кл ⁻¹	HM
10	1240 ± 40	520 ± 30	$1,\!25 \pm 0,\!04$
20	1750 ± 40	690 ± 30	$1,\!41 \pm 0,\!04$
30	2030 ± 60	930 ± 50	$1{,}60\pm0{,}05$
40	1830 ± 70	870 ± 40	$1,\!70\pm0,\!06$
50	1590 ± 50	830 ± 50	$1,74 \pm 0,06$
60	2430 ± 40	960 ± 50	$1,73\pm0,03$

Литература

- 1. Sergey E. Svyakhovskiy, Anton I. Maydykovsky, and Tatiana V. Murzina. Mesoporous silicon photonic structures with thousands of periods // J. Appl. Phys. 2012. 112. 013106.
- Lingxia Zheng, Hua Cheng, Fengxia Liang, Shiwei Shu, Chun Kwan Tsang, Hui Li, Shuit-Tong Lee and Yang Yang Li. Porous TiO₂ Photonic Band Gap Materials by Anodization // J. Phys. Chem. C. 2012. 116 (9). P. 5509–5515.
- 3. *Wang Kaiying, Liu Guohua, Hoivik Nils, Johannessen Erik and Jakobsen Henrik* Electrochemical engineering of hollow nanoarchitectures: pulse/step anodization (Si, Al, Ti) and their applications // Chem. Soc. Rev. 2014. 43. P. 1476–1500.

УДК 535.015

Экстраординарное пропускание массивов микроотверстий в тонкой металлической пленке в зависимости от диаметра отверстия

Ч.Т.Х. Нгуен^{1,2}, С.И. Кудряшов^{1,3}, П.А. Данилов¹, А.А. Ионин¹, Р.А. Хмельницкий¹, А.А. Руденко¹, И.Н. Сараева¹, Д.А. Заярный¹

¹ Физический институт им. Лебедева РАН ² Московский физико-технический институт (государственный университет) ³ Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики

Экстраординарное пропускание света (ЭПС), электромагнитного излучения в видимом и ИК-диапазонах через маленькие (диаметр d < 0,3 мкм, с волноводным эффектом для больших отверстий) отверстия был открыт в 1990-х годах как плазмонный эффект, подчиняющийся дифракционной теории Бете и Букампа, описывающей пропускание через такие маленькие одиночные отверстия. Эта теория предсказывает абсолютное пропускание бесконечно тонкой плёнки с бесконечной проводимостью (идеальный металл без диссипации) в виде

$$T(\nu, d) = \frac{64}{27\pi^2} \left(2\pi\nu\frac{d}{2}\right)^4.$$
 (1)

Непрозрачная плёнка из серебра толщиной 30 нм (T < 1% в диапазоне 800–3000 см⁻¹, рис. 1а) с вышеупомянутым волноводным ППП – усиленным пропусканием массивов микроотверстий с диаметром $d \approx 4$ мкм и периодом $a_0 \approx 6$ мкм изучалась на предмет изменения диаметра d = 2, 3 и 4 мкм [1], который является еще одним ключевым параметром теории Бете–Букампа. В нашем случае такое изменение диаметра d приводит не только к заметному увеличению нормированного максимального ИК-пропускания и его небольшому красному смещению основного пика около \approx 1100 см⁻¹ (рис. 1), но и к разным тенденциям на «красном» спектральном участке этих зависимостей [2].



Рис.1. а – Нормированные спектры пропускания обычной и перфорированной решетки (диаметр отверстия *d* ≈ 2, 3, 4 мкм и период *a*₀ ≈ 6 мкм) на серебряной плёнке с толщиной 30 нм в обычном и б – двойном логарифмическом масштабах (в последнем случае – вместе с их линейными приближениями для областей малых волновых чисел). Вставка: (б) таблица приближенных параметров – смещения и угловые наклоны для различных диаметров отверстий

Литература

- 1. Данилов П.А., Заярный Д.А., Ионин А.А., Кудряшов С.И., Нгуен Ч.Т.Х., Руденко А.А., Сараева И.Н., Кучмижак А.А., Витрик О.Б., Кульчин Ю.Н. Структура и механизмы лазерного формирования микроконусов на поверхности серебряных пленок варьируемой толщины // Письма в ЖЭТФ. 2016. Т. 103. № 8. С. 617–621.
- Pavel N. Danilov, Sergey A. Gonchukov, Andrey A. Ionin, Roman A. Khmelnitskii, Sergey I. Kudryashov, Trang T. H. Nguyen, Andrey A. Rudenko, Irina N. Saraeva and Dmitry A. Zayarny. Background-free, highly sensitive surface-enhanced IR absorption of rhodamine 6G molecules deposited onto an array of microholes in thin silver film // Laser Phys. Lett. 2016. 13. 055602. P. 5.

Секция космических исследований и современной астрофизики

УДК 53.082.52

Создание лабораторного макета гетеродинного спектрометра среднего ИК-диапазона для исследования планетных атмосфер

В.В. Гарамов, В.М. Семенов, О.В. Бендеров, С.В. Малашевич

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Наиболее информативным источником данных о состоянии планеты и ее эволюции является атмосфера. На основе изучения спектральных свойств атмосферы может быть получена средняя концентрация основных и малых газовых составляющих, их вертикальное распределение, вертикальные профили давления и температуры. При проведении измерений с высоким спектральным разрешением возможно прямое измерение скорости ветра, основанное на регистрации доплеровского смещения отдельных спектральных линий. Последнее дает возможность восстановления энергетического баланса и картины глобальной циркуляции атмосферы планеты. Подобные данные могут использоваться для верификации трехмерных численных моделей атмосферы [1, 2].

Для решения такого рода задач с 1970-х годов применяется метод гетеродинной спектроскопии. В связи с созданием стабильных лазерных источников в диапазоне 4– 14 мкм появилась возможность дальнейшего совершенствования гетеродинных спектрометров [3]. Подобные приборы уникальны и разрабатываются всего несколькими научными группами во всем мире [4, 5]. Применение актуальных разработок позволит использовать гетеродинную ИК-спектроскопию для непрерывного мониторинга движения воздушных масс, работая с широко распространенными телескопами метрового класса.

Ключевое отличие предложенной концепции прибора от существующих аналогов – использование волоконной оптики в оптической схеме инструмента. Впервые планируется применение волоконных разветвителей для среднего ИК-диапазона. До сих пор не существует налаженной технологии производства волокон с малыми потерями для этого участка спектра, а также и разветвителей таких волокон. Однако стоит отметить большой прогресс в развитии халькогенидных волокон в последние годы [6].

Другой особенностью разрабатываемого прибора является динамическая стабилизация длины волны излучения лазерного источника по реперной спектральной линии поглощения исследуемого газа. Линия регистрируется в режиме прямого детектирования при подаче на лазер тока накачки пилообразной формы с целью модуляции генерируемого излучения. Частота генерируемого лазером излучения корректируется по разности между частотой пика линии поглощения в реперном канале и частотой генерации лазера.

К настоящему времени нашей группой разработана схема гетеродинного спектрометра для реальных наблюдений в условиях обсерватории. Создан лабораторный макет прибора. Был спроектирован и изготовлен вакуумированный охлаждаемый корпус квантово-каскадного лазера (ККЛ) с распределенной обратной связью, используемого в качестве локального осциллятора [7]. Исследовались рабочие характеристики ККЛ с длиной волны излучения 7,78 мкм. В реализованном лабораторном макете гетеродинного спектрометра регистрация излучения осуществляется с помощью CdHgTe-фотодетектора со встроенным термоэлектрическим охладителем. Было разработано программное обеспечение на базе платформы LabView для автоматического управления спектрометром и обработки результатов.

Был продемонстрирован эффект гетеродинирования при смешении излучения АЧТ, разогретого до 400 °C, и лазерного излучения на длине волны 7,78 мкм. При этом уровень гетеродинного сигнала составлял около 10% от дробовых шумов излучения лазера.

Получены первые результаты по наблюдению линии поглощения в гетеродинном режиме детектирования, что является имитацией наблюдения линии поглощения в континуальном эмиссионном спектре. Для этого в режиме прямого детектирования были исследованы контуры спектральных линий поглощения ацетилена в кювете при давлении около 7 торр. Выбрана наиболее ярко выраженная линия, после чего кювета была помещена в гетеродинный канал. По полученным результатам рассчитан спектр коэффициента поглощения ацетилена.

Изучались различные источники шумов системы. Теоретическим пределом гетеродинного спектрометра является квантовый чувствительности предел. определяющийся дробовыми шумами локального осциллятора. Нами были экспериментально определены шумовые характеристики системы в терминах шумовой температуры методом Y-фактора [1]. В случае использования CdHgTe-фотодетектора шумовая температура составила T_{noise} ≈ 10⁴ К (при квантовом пределе 1845 К). Данный результат определяется достаточно высоким уровнем шумов быстродействующих CdHgTeфотодетекторов с термоэлектрическим охлаждением и сопоставим с результатами, полученными другими группами [8]. Шумовая температура единственного на сегодня применяемого в астрономических наблюдениях гетеродинного спектрометра составляет 3000 K [2].

Поскольку в настоящее время на рынке отсутствуют CdHgTe-фотодетекторы с полосой > 500 МГц и уровнем собственных шумов, позволяющим достигнуть величин порядка единиц квантового предела, большой интерес в данной задаче представляет использование криоохлаждаемых фотоэлектронных болометров на основе эффекта электронного разогрева (Hot Electron Bolometer, HEB). Уровень шумов таких детекторов приближен к теоретическому минимуму, а полоса пропускания достигает ~5 ГГц. Нами рассматривается возможность использования подобного детектора, совмещенного со спиральной микроантенной, настроенной на длину волны 10 мкм для повышения квантовой эффективности [9]. В рамках данной работы были исследованы световые и темновые вольт-амперные характеристики подобного болометра при различных температурах. Ведутся работы по измерению диаграммы направленности спиральной микроантенны.

Нами были сделаны оценки требуемого отношения сигнал/шум для решения ряда астрономических задач, таких как восстановление вертикального профиля температуры Венеры по измеренным спектрам. Для заданных отношений сигнал/шум были сделаны оценки времени накопления сигнала для различных источников: тепловая и неравновесная эмиссии Марса, Венеры.

Таблица 1

Спектральный диапазон	5—11 мкм
Используемые ЛО	5.4 мкм, 7.78 мкм, 10.4 мкм
Детекторы	CdHgTe-фотодетектор, HEB со спиральной антенной на 10 мкм
Полоса пропускания детектора	~3 ГГц (HEB), 850 МГц (CdHgTe)

Характеристики разрабатываемого прибора

Анализатор спектра	Цифровой FFT-спектрометр	
Разрешение анализатора спектра	1 кГц-10 МГц	

- 1. *Krötz P*. Observations of Upper Mesosphere Temperatures on Venus and Evaluation of Mid-Infrared Detectors for the Tuneable Infrared Heterodyne Spectrometer (THIS): diss. Universität zu Köln, 2010.
- Nakagawa H. [et al.]. IR heterodyne spectrometer MILAHI for continuous monitoring observatory of Martian and Venusian atmospheres at Mt. Haleakalā, Hawaii // Planetary and Space Science. 2016. V. 126. P. 34–48.
- 3. Schmülling F. [et al.]. High-sensitivity mid-infrared heterodyne spectrometer with a tunable diode laser as a local oscillator / /Applied optics. 1998. V. 37. N. 24. P. 5771–5776.
- Kostiuk T. Heterodyne spectroscopy in the thermal infrared region: a window on physics and chemistry // NASA Goddard Space Flight Center, Proceedings of the International Thermal Detectors Workshop. 2003.
- 5. Sornig M. Investigations of Upper Atmosphere Dynamics on Mars and Venus by High Resolution Infrared Heterodyne Spectroscopy of CO2. 2009.
- 6. Stevens G. [et al.]. Mid-IR fused fiber couplers // SPIE LASE. International Society for Optics and Photonics. 2016. P. 973007–973007-8.
- 7. Faist J. [et al.]. Quantum cascade laser // Science. 1994. V. 264.N 5158. P. 553-556.
- 8. Weidmann D. [et al.]. Hollow waveguide photomixing for quantum cascade laser heterodyne spectroradiometry // Optics express. 2011. V. 19. N 10. P. 9074–9085.
- 9. Shcherbatenko M. [et al.]. Antenna-Coupled 30 THz Hot Electron Bolometer Mixers // International Symposium on Space Terahertz Technology (ISSTT). 2015.

УДК 533.937

Wave phenomena in the Moon environment

M. Buchenkova^{1,2}, A. Skalsky¹, A. Sadovski¹

¹Space Research Institute of the Russian Academy of Sciences ²Moscow Institute of Physics and Technology (State University)

The paper is aimed to review actual observations and different mechanisms of wave and magnetic disturbances generation in plasma environment around the Moon: in solar wind closely to the Moon, over the magnetic field anomalies at its surface, in the lunar wake and around its boundaries. The generating mechanisms, propagation and other characteristics of waves are presented.

Particular attention is pointed on Electrostatic Solitary Waves (ESWs), monochromatic whistlers, large-amplitude monochromatic ULF waves and non-monochromatic whistler waves.

References

- 1. *Halekas J.S., Brain D.A., Mitchell D.L., Lin R.P., and Harrison L.* On the occurrence of magnetic enhancements caused by solar wind interaction with lunar crustal fields // Geophysical research letters. 2006.
- 2. Shin K., Kojima H., Matsumoto H., and Mukai T. Characteristics of electrostatic solitary waves in the Earth's foreshock region: Geotail observations // Journal of geophysical research. 2008.
- 3. Deng X.H., Tang R.X., Matsumoto H., Pickett J.S., Fazakerley A.N., Kojima H., Baumjohann W., Coates A., Nakamura R., Gurnett D.A., Liu Z.X. Observations of electrostatic solitary waves associated with reconnection by Geotail and Cluster // Advances in space research. 2006.

Внутренняя структура релятивистских джетов, коллимированных внешним давлением

А.В. Черноглазов¹, В.С. Бескин^{1,2}, А.М. Киселев^{1,2}, Е.Е. Нохрина¹

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Джет – это узкая струя плазмы, выбрасываемая из центра (ядра) таких астрономических объектов, как активные галактики, квазары и радиогалактики. Недавний прогресс в наблюдениях на интерферометре со сверхдлинной базой (VLBI) дал точную информацию о ширине джетов $r_{jet}(l)$ в зависимости от расстояния l от «центральной машины», которой принято считать сверхмассивную черную дыру. Эти наблюдения позволяют более точно определять внутреннюю структуру выбросов и проверять наши теории. В докладе будет рассмотрен релятивистский джет, погруженный в среду с относительно малым тепловым давлением газа. Предложенное решение не будет использовать дополнительных спорных предположений ни о сильном регулярном магнитном поле снаружи струи, ни о тонком токовом слое на границе, вводящимся во многих предыдущих работах.

Согласно наиболее общепринятой точке зрения, зарождение релятивистских джетов связано с сильно-замагниченным потоком плазмы из быстро вращающейся черной дыры в центре галактики. Из-за дифференцированного вращения аккреционного диска магнитные силовые линии сильно закручены, и давление магнитного поля коллимирует поток. Многочисленные теоретические рассмотрения и численные моделирования подтверждают, что предложенная выше (магнито-гидродинамическая) модель может достаточно точно описать коллимацию.

Но, тем не менее, остаются несколько нерешенных вопросов. Первый из них: из-за электрической нейтральности центрального объекта, суммарный вытекающий ток должен быть равен нулю. В большинстве предыдущих работ, исследующих центральную часть джета, молчаливо полагалось, что ток неизбежно обратится в нуль на краю. Поэтому вводился бесконечно тонкий пограничный токовый слой, который также отделяющий внешнюю среду от течения и исключал их взаимное влияние. Другой острой проблемой является большая разница в плотности энергии внутри джета и снаружи. Поэтому для удержания релятивистской струи при моделировании вводилось внешнее продольное магнитное поле, создающее необходимое давление.

Мы предлагаем подход, не требующий этих дополнительных условий. Наиболее важным при описании является область замыкания тока. Мы считаем, что ток замыкается на границе трубки джета, через который проходит весь магнитный поток. Будет показано, что для самосогласованного решения магнитное поле, дающее основной вклад в поперечное давление, на краю оказывается гораздо меньше амплитудного значения. Так как в нашем рассмотрении на краю большинство величин становятся малыми, то для правильной оценки каждой из них мы использовали интеграл, связывающий угловую скорость, содержащую информацию о потоке магнитного поля Ψ и альфвеновское число Маха М, дающее информацию о плотности частиц плазмы:

$$H \approx \frac{\Omega_F(\Psi)r^2}{M^2} \tag{1}$$

Определяя этот интеграл вдали от границы, мы получили оценку для магнитного поля на самом краю джета. Оно оказалось мало по сравнению с предсказываемым ранее (рис. 1). Наши вычисления позволили определить ширину струи как функцию внешнего давления, которое может быть достаточно малым:

$$P_{ext} \approx \frac{B_{amp}^2}{8\pi} \Longrightarrow P_{ext} \approx \frac{1}{h^2(x_{iet})} \frac{B_{amp}^2}{8\pi}.$$
 (2)



Рис. 1. Отношение напряженности магнитного поля на краю к амплитудному значению как функция радиуса джета при различных параметрах истечения

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант (16-12-10051)

Литература

 Beskin V.S.; Chernoglazov A.V.; Kiselev A.M.; Nokhrina E.E. On the internal structure of relativistic jets collimated by ambient gas pressure // MNRAS. 2017. V. 472. I. 4. P. 3971–3978.

УДК 52-782

Исследование автомодельного решения о распространении сильной ударной волны в расширяющейся Вселенной

С.А. Панафидина^{1,2}, Г.С. Бисноватый-Коган²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт космических исследований РАН

В данной работе мы рассмотрели задачу о распространении сильной ударной волны в равномерно расширяющейся среде, соответствующей решению Фридмана для плоской Вселенной, проанализировали автомодельные решения, в которых имеются сингулярности, связанные с сингулярностью в решении Фридмана. Аналитические решения для различных значений показателя адиабаты у принципиально отличаются друг от друга.

Приведем точное решение для сильных ударных волн, распространяющихся в однородной расширяющейся самогравитирующей среде со скоростью, стремящейся к нулю со временем. Уравнения в сферических координатах в этом случае записано как

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} - \frac{G_g m}{r^2}, \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v}{\partial r} + \frac{2\rho v}{r} = 0,$$
$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial r}\right) ln \frac{p}{\rho^{\gamma}} = 0, \frac{\partial m}{\partial r} = \frac{4}{3}\rho r^2,$$

где G_g – гравитационная постоянная.

В случае точечного взрыва с энергией *E*, задача обладает свойством автомодельности. Безразмерная комбинация в случае равномерно расширяющихся сред выглядит как $r\left(\frac{\delta}{ET^4}\right)^{1/5}$. Положение ударной волны в автомодельном решении должно соответствовать фиксированному значению автомодельной координаты. Введем

безразмерные переменные позади ударной волны как $v = \frac{4r}{5t}V$, $\rho = \frac{\delta}{t^2}G$, $c^2 = \frac{16r^2}{25t^2}Z$, $m = \frac{4\pi}{3}\rho_0 r^3 M$, зависящие от автомодельной переменной ξ , определенной как $\xi = \frac{r}{R(t)} = \frac{r}{\beta} \left(\frac{\delta}{Et^4}\right)^{1/5}$. Здесь $\delta = \frac{1}{6\pi G_g}$, β – число, зависящее только от показателя адиабаты γ , ρ_0 – плотность газа позади ударной волны.

Условия на сильной ударной волне при $r = R, \xi = 1$ в безразмерных переменных записаны как

$$V(1) = \frac{5\gamma+7}{6\gamma+1}, G(1) = \frac{\gamma+1}{\gamma-1}, Z(1) = \frac{\gamma(\gamma-1)}{18(\gamma+1)^2}, M(1) = 1.$$

Данная задача имеет первый интеграл:

$$Z = \frac{(\gamma - 1)(1 - V)(V - \frac{5}{6})^2}{2(V - \frac{5}{6} - \frac{1}{6\gamma})}$$

Тогда решение для $V(\xi)$ будет выглядеть следующим образом:

$$\xi = \left[(\gamma+1)(3V - \frac{5}{2}) \right]^{\mu_1} \left[\frac{(\gamma+1)(6\gamma V - 5\gamma - 1)}{\gamma - 1} \right]^{\mu_2} \left[\frac{6(\gamma+1)(3\gamma V - V - \frac{5}{2})}{15\gamma^2 + \gamma - 22} \right]^{\mu_3},$$

где μ_1, μ_2, μ_3 – константы, зависящие только от показателя адиабаты.

$$G(V) = \frac{\gamma+1}{\gamma-1} \left[\frac{6(\gamma+1)(1-V)}{\gamma-1} \right]^{k_1} \left[\frac{(\gamma+1)(6\gamma V - 5\gamma - 1)}{\gamma-1} \right]^{k_2} \left[\frac{3(\gamma+1)((6\gamma-2)V - 5)}{15\gamma^2 + \gamma - 22} \right]^{k_3}$$

где k_1, k_2, k_3 – константы, зависящие только от показателя адиабаты. Функция Z(V) определена интегралом энергии.

Из графиков и аналитического решения для $V(\xi)$, $G(\xi)$, $Z(\xi)$ мы можем получить асимптотики. Так, при $\xi \to 0$ функция V стремится к постоянному пределу, равному $\frac{5\gamma+1}{6\gamma}$, т.е.

$$V = \frac{5\gamma + 1}{6\gamma} + \text{const} \cdot \xi^{1/\mu_2},$$

$$G \sim \xi^{k_2/\mu_2} \to 0 \text{ при } \xi \to 0,$$

$$Z \sim \xi^{-1/\mu_2} \to \infty \text{ при } \xi \to 0.$$

Наша работа полезна для дальнейшего описания ударных волн при взрывах сверхновых звезд. Из предсверхновой звезды истекает звездный ветер, который можно рассматривать как расширяющуюся среду. При взрыве сверхновой возникают ударные волны, распространяющиеся в звездном ветре, что соответствует постановке рассматриваемой нами задачи. Распределение скоростей, плотностей и давлений внутри сферы, ограниченной волновым фронтом, описывается автомодельным решением.



Рис. 1. Семейство кривых V для различных значений показателя адиабаты

_ _ _ _



Рис. 2. Семейство кривых G для различных значений показателя адиабаты



Рис. 3. Семейство кривых Z для различных значений показателя адиабаты

- 1. *Bisnovatyi-Kogan G.S.* Strong shock in the uniformly expanding medium // Gravitation and Cosmology. 2015. V. 21. P. 236–240.
- 2. Zeldovich Ya.B., Novikov I.D Relativistic astrophysics. Volume 2. The structure and evolution of the universe Chicago, IL: University of Chicago Press, 1983. V.M. Safronov, N.I. Arkhipov, I.S.
- 3. Седов Л.И. Методы подобия и размерностей в механике. М.: Наука, 1977.

УДК 524.354

Статистика ортогональных интеримпульсных радиопульсаров как тест закона их эволюции

В.С. Бескин^{1,2}, П.А. Герасименко¹, Е.А. Гусев¹

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

В настоящее время существует две основных модели эволюции угла наклона оси магнитного диполя к оси вращения радиопульсаров χ . Согласно наиболее распространенной МГД-модели, основанной на результатах численного моделирования [1], угол χ с течением времени уменьшается, тогда как согласно аналитической модели БГИ [2] – стремится к 90°. Тестовой проверкой теории торможения стало бы прямое определение направления эволюции угла наклона между осью магнитного диполя и осью вращения. К сожалению, до сих пор никаких сколь-либо надежных результатов относительно этой величины получено не было. Правда, предпринимались попытки определить направление эволюции угла наклона, анализируя распределения радиопульсаров как по самому углу наклона осей χ , так и по ширине их средних профилей. При этом часто делался вывод, что угол наклона стремится к нулю. Однако, как уже

отмечалось в [2], при этом не учитывалась зависимость «линии смерти» от угла наклона. Дело в том, что при достаточно больших периодах P рождение плазмы возможно лишь при малых углах наклона осей χ . Соответственно, независимо от закона эволюции индивидуальных пульсаров, среднее значение угла χ должно уменьшаться с ростом периода вращения.

Понятно, что последовательный учет зависимости «линии смерти» от угла χ может быть выполнен лишь на основе кинетического подхода, при котором анализируются многопараметрические распределения. К сожалению, до сих пор в подавляющем большинстве работ эволюция угла наклона при таком анализе не принималась во внимание. Лишь в последнее время стали появляться работы, в которых эволюция угла χ учитывалась достаточно последовательно. Однако и в этом случае никаких уверенных утверждений относительно направления эволюции угла наклона сделано не было.

Не получилось дать ответ и в работе [3], в которой была сделана попытка сформулировать тест, который позволил бы определить направление эволюции угла наклона. Идея была связана с анализом относительного количества интеримпульсных пульсаров, т.е. пульсаров, у которых, помимо основного импульса, наблюдается еще один импульс излучения, расположенный примерно посередине между последовательными главными импульсами. Как известно, интеримпульс может наблюдаться либо у пульсаров с углом наклона $\chi \sim 90^{\circ}$ (когда интеримпульс связан с излучением от другого магнитного полюса), либо с углом наклона $\chi \sim 0^{\circ}$ (когда главный импульс и интеримпульс связаны с двумя прохождениями через диаграмму направленности, имеющую вид «полого конуса»). Понятно, что число пульсаров с углами $\chi \sim 0^{\circ}$ и $\chi \sim 90^{\circ}$ существенно зависит от направления эволюции угла наклона. Однако оказалось, что наблюдаемое количество интеримпульсных радиопульсаров можно объяснить как в рамках модели БГИ, так и в МГД-модели. Это связано со значительной неопределенностью начального распределения пульсаров по углу χ и периоду *P*. Так или иначе, было показано, что наблюдаемое распределение пульсаров по углу χ не противоречит модели БГИ.

С другой стороны, аналитический метод, используемый в [3], не позволял определить количество ортогональных интеримпульсных пульсаров в модели БГИ. Прежде всего, это было связано с тем, что в модели БГИ закон эволюции

$$\dot{P}_{-15} = Q \frac{B_{12}^2}{P} \cos^2 \chi + A \frac{B_{12}^2}{P}, rge A = 2 \left(\frac{\Omega R}{c}\right)^{1/2},$$
 (1)

$$\dot{\chi} = Q \frac{B_{12}^2}{P} \sin \chi \cos \chi \tag{2}$$

 $(B_{12} = B/10^{12} \ \Gamma c)$ не задается простой аналитической формулой. Кроме того, большую роль здесь должна была играть зависящая от величины магнитного поля «линия смерти», определяемая из условия Q = 1 [3]:

$$Q = P^{15/14} B_{12}^{-4/7} \cos^{2d-2} \chi , \qquad (3)$$

где $d \approx 0,75$ [2]. Поэтому единственным способом, позволяющим оценить количество ортогональных интеримпульсных пульсаров в модели БГИ, является метод Монте-Карло. Этому вопросу и посвящена настоящая работа.

При определении количества ортогональных интеримпульсных пульсаров были сделаны следующие предположения.

1. Функция видимости, связанная с необходимостью попасть в диаграмму направленности, выбиралась стандартным образом

$$V_{beam}^{vis} = W_0 \sin \chi, \, \chi > W_0 \,, \tag{4}$$

$$V_{beam}^{vis} = W_0^2, \ \chi < W_0,$$
 (5)

где
$$W_0 = 5, 4^\circ / \sqrt{P}$$
. (6)

2. Функция видимости, связанная с невозможностью наблюдать далекие слабые пульсары, задавалась более точной формулой [3]:

$$L \sim P^{-0.2} \cos^{1/2} \chi$$
 (7)

- Начальное распределение по периодам *P* и углам наклона χ было выбрано таким же, как и в работе [3], которое давало наилучшее согласие для случая соосных интеримпульсных пульсаров, т.е. линейно растущее распределение по периоду *P* и равномерное по углу χ.
- 4. Распределение по магнитному полю определялось как

$$f(\mathbf{B}_{12}) \sim \frac{\mathbf{B}_{12}^a}{(1+\mathbf{B}_{12})^b},$$
 (8)

где коэффициенты $a \approx 0,5$ и $b \approx 2,6$ были найдены из наблюдаемого распределения пульсаров.

В результате, было определено относительное количество нейтронных звезд, которые в рамках модели БГИ могли наблюдаться как соосные интеримпульсные пульсары. При этом было показано, что их количество не противоречат наблюдаемым данным.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 17-02-00788.

Литература

- 1. *Spitkovsky A*. Time-dependent Force-free Pulsar Magnetospheres: Axisymmetric and Oblique Rotators // Ap. J. 2006. V. 648, I. 1. P. L51–L54.
- 2. Бескин В.С.; Гуревич А.В.; Истомин Я.Н. Электродинамика магнитосферы пульсара // ЖЭТФ. 1983. Т. 85, Вып. 4. С. 401–433.
- 3. Arzamasskiy L. I.; Beskin V. S.; Pirov K. K. Statistics of interpulse radio pulsars: the key to solving the alignment/counter-alignment problem // MNRAS. 2017. V. 466, I. 2. P. 2325–2336.

УДК 523.43-852

Восстановление температурных профилей в атмосфере Марса по данным спектрометра TIRVIM миссии Экзомарс-2016

П.В. Власов^{1,2}, Н.И. Игнатьев²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт космических исследований РАН

В марте 2016 года была запущена миссия Экзомарс-2016 с целью всестороннего изучения Марса. На орбитальном аппарате TGO (Trace Gas Orbiter) в числе прочих приборов установлен разработанный в Институте космических исследований РАН комплекс ACS (Atmospheric Chemistry Suite) [1], включающий в себя три спектрометра: NIR, MIR и TIRVIM. Фурье-спектрометр TIRVIM предназначен для исследования в надирном и затменном режимах температурных и аэрозольных профилей в спектральном диапазоне 1,7–17 мкм, а также малых газовых составляющих. Осенью 2016 года во время манёвров TGO были получены первые тестовые данные с приборов ACS. По полученным с TIRVIM первым данным было произведено самосогласованное восстановление температурных и аэрозольных профилей в атмосфере Марса. Восстановление профилей было реализовано двумя методами: при помощи итерационной процедуры релаксации и методом статистической регуляризации.

В случае релаксации при восстановлении температурного профиля выбираются m спектральных каналов, для которых определяется яркостная температура измеренного излучения T_{v_i} , и m атмосферных уровней, на которых восстанавливается температура и концентрация аэрозолей. Сама процедура релаксации основана на модифицированном итерационном методе Шахина–Тумей [2]:

$$T_{j}^{(n+1)} = T_{j}^{(n)} \frac{\sum_{i=1}^{m} \frac{T_{v_{i}}}{\tilde{T}_{i}^{(n)} \left(\frac{\partial t_{v}}{\partial \log P}\right)_{ij}}}{\sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial t_{v}}{\partial \log P}\right)_{ij}}, \quad T_{v_{i}} = \frac{1.4388 \cdot v_{i}}{\ln\left(\frac{1.1911 \cdot 10^{-5} \cdot v_{i}^{3}}{I_{v_{i}} + 1}\right)}.$$
(1)

Здесь T_{v_i} – яркостная температура в *i*-м спектральном канале, i = 1, m, $v_i [cm^{-1}]$ – волновое число *i*-го спектрального канала, $I_{v_i} [\frac{\Im pr}{c \ cp \ cm^2 cm^{-1}}]$ – измеренная интенсивность

излучения,
$$\left(\frac{\partial t_{\nu}}{\partial \lg P}\right)_{ij}$$
 – весовые функции, определяющие вклад данного *j*-го атмосферного

уровня с давлением P и температурой T в *i*-м спектральном канале, t_v – функция пропускания атмосферы от заданного уровня до верхней границы, $T_j^{(n)}$, j = 1, m – восстанавливаемый температурный профиль на *n*-й итерации. Итерационная процедура выполняется до сходимости измеренного спектра I_{v_i} и синтетического спектра на *n*-й итерации $\tilde{I}_i^{(n)}$ в пределах шума. Аналогичная итерационная процедура применяется для восстановления профилей концентрации пыли и водяного льда.

Метод статистической регуляризации [3] основан на расчёте не только синтетического спектра излучения, но также его функциональных производных по произвольным параметрам, одними из которых являются температурный и аэрозольные профили. Задача заключается в минимизации разницы между моделируемым спектром при варьирующихся параметрах и измеренным спектром путём минимизации функции:

$$\phi = (y_m - y_n)^T S_{\varepsilon}^{-1} (y_m - y_n) + (x_n - x_0)^T S_x^{-1} (x_n - x_0).$$
(2)

Здесь y_m – измеренный спектр, y_n – синтетический спектр на *n*-й итерации, представленный вектором состояний x_n , в качестве которого берутся температурный или аэрозольный профили, x_0 – априорный вектор состояний (первоначальное предположение для профилей), S_{ε} – ковариационная матрица ошибок (включает в себя шум), S_x – априорная ковариационная матрица. Непосредственно итерационный процесс имеет вид

$$x_{n+1} = x_0 + S_x K_n^T \left(K_n S_x K_n^T + S_{\varepsilon} \right)^{-1} \left(y_m - y_n - K_n \left(x_0 - x_n \right) \right),$$

(3)

где x_{n+1} – новая оценка вектора состояний, K_n – матрица функциональных производных, или якобиан, на *n*-й итерации.

Таким образом, реализованные методы восстановления позволяют получать температурный и аэрозольный профили в атмосфере Марса по текущим и будущим данным спектрометра TIRVIM миссии Экзомарс-2016.



Рис. 1. Измеренные TIRVIM спектры $I_V[K]$ (а) и восстановленные по ним температурные профили T[K] в атмосфере Марса как функция высоты (б)

- 1. Korablev O.I. [et al.]. ACS experiment for atmospheric studies on "ExoMars-2016" Orbiter // Solar System Research. 2015. V. 49. P. 529–537.
- 2. *Twomey S., Herman D., Rabinof R.* An extension of Chahine method of inverting the radiative transfer solution equation // Journal of the Atmospheric Sciences. 1977. V. 34. P. 1085.
- 3. *Rodgers C.D.* Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice. Singapore: World Scientific, 2000.

УДК 52-323.2

Изучение центральных областей квазаров путём сопоставления их положений, измеренных РСДБ и Gaia

А.В. Плавин^{1,2}, Ю.Ю. Ковалев^{1,2,3}, Л.Ю. Петров⁴

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ² Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН ³Max-Planck-Institut für Radioastronomie ³Astrogeo Center

В 2016 году были опубликованы первые данные миссии Gaia – космического оптического телескопа, содержащие положения 1,14 миллиарда звёзд и галактик с точностью до миллисекунд дуги. Мы сопоставили эти положения с высокоточной системой координат на основе РСДБ измерений 11,4 тысяч активных ядер галактик и нашли 7% объектов, координаты которых в радио- и оптическом диапазонах значимо сдвинуты друг

относительно друга. Оказалось, что этот сдвиг, преимущественно, параллелен направлениям их джетов. Смещение от радио до оптики по направлению центральной машины обнаружено на уровне около или ниже 1 mas и объясняется синхротронным самопоглощением в ядре и протяжённой структурой в радиодиапазоне. Наши результаты массового измерения сдвига ядра по РСДБ-наблюдениям соответствуют такой величине смещения. При этом, смещение от центра имеет величину от 0 до более 10 mas. Мы объясняем это наличием ярких протяженных оптических джетов на масштабах парсеков. Таким образом, можно считать эти измерения первыми массовыми наблюдательными указаниями на существование оптических струй активных галактик. Их необходимо учитывать для увеличения точности сличения инерциальных систем отсчета, построенных в радио- и оптическом диапазонах. Данный эффект открывает новые уникальные возможности по массовому восстановлению и изучению свойств центральных областей квазаров (аккреционного диска и джета) на масштабах парсеков.

УДК 533.951

Моделирование распространения низкочастотных волн в ионосфере Земли

И.В. Кузичев¹, А.Ю. Малыхин^{1,2}

¹Институт космических исследований РАН ²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Низкочастотные волны, генерируемые в атмосфере и нижней ионосфере ОНЧ-передатчиков разрядами, сигналами наземных молниевыми ИТ.П., распространяющиеся в ионосфере и магнитосфере Земли в свистовой и ионноциклотронной модах, играют важную роль в динамике частиц магнитосферы. В частности, ионно-циклотронные волны, возбуждаемые излучением молниевых разрядов, могут резонансно взаимодействовать с ионами, приводя к их ускорению [1]. Свистовые волны взаимодействуют с электронами радиационных поясов, что приводит к ускорению и высыпанию электронов [2]. Поэтому описание распространения этих волн представляет собой важную задачу ионосферно-магнитосферной физики. В верхних слоях ионосферы и в магнитосфере распространение низкочастотных волн хорошо описывается в рамках геометрической оптики, однако в нижних слоях ионосферы, где параметры плазмы меняются быстро и становятся существенны столкновения, геометрическая оптика не применима, и требуется волновое описание. Одной из наиболее серьёзных проблем, связанных с моделированием распространения низкочастотных волн в рамках полного волнового описания является проблема численной неустойчивости. Дело в том, что в свистовом диапазоне частот дисперсионное уравнение помимо распространяющейся моды содержит затухающую моду. Наличие этой нефизической моды при численном решении уравнений приводит к тому, что такая мода, возникнув за счёт численных ошибок, экспоненциально нарастает, так что физическую моду уже невозможно выделить из решения [3]. Для преодоления этой трудности были предложены различные методы, как численные [4], так и аналитические, сводящие полную систему уравнений к приближённой, не содержащей быстро растущих решений [5]. Все эти методы обладают своими достоинствами и недостатками: так, например, аналитический метод [5] работает только для малых углов распространения, а численный метод [4] не позволяет гибко менять точность, по сути аппроксимируя высотную зависимость параметров ионосферы ступенчатой функцией. В данном докладе мы представляем результаты моделирования распространения низкочастотных волн, где указанная проблема численной неустойчивости решалась методом Абрамова [6], который представляет собой улучшенный вариант метода прогонки. Преимущество данного метода заключается в том, что он даёт быстрое, с точки зрения времени вычислений и точное (без учёта численных ошибок), решение поставленной задачи. Нами были получены решения волнового уравнения для различных источников и различных параметров ионосферы, взятых из модели IRI, рассчитаны коэффициенты прохождения для разных частот. Также проведены расчёты для случая падения волны на ионосферу сверху, продемонстрировано квазипериодическое поведение коэффициента отражения. Результаты наших расчётов согласуются с результатами, полученными в рамках других численных моделей, и с экспериментальными данными.

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФИ 16-32-00721 мол а.

Литература

- 1. *Kuzichev I.V., Shklyar D.R.* Resonant interaction of suprathermal ions with lightning-generated ion cyclotron waves // Proceedings of the 11th International School and Conference Problems of Geocosmos, 2016.
- 2. *Shklyar D., Matsumoto H.* Oblique whistler-mode waves in the inhomogeneous magnetospheric plasma: resonant interactions with energetic charged particles // Surv.in Geophys. 2009. V. 30. P. 55–104.
- 3. Budden K. G. The Propagation of Radio Waves. Cambridge, U. K: Cambridge Univ. Press, 1985.
- Lehtinen N.G., Inan U.S. Radiation of ELF/VLF waves by harmonically varying currents into a stratified ionosphere with application to radiation by a modulated electrojet // J. Geophys. Res. 2008. V. 113, N A6.
- Kuzichev I.V., Shklyar D.R. On full-wave solution for VLF waves in the near-Earth space // J. Atm. Sol. Terr. Phys. 2010. V. 72, N 13. P. 1044–1056.
- 6. Абрамов А.А. О численной устойчивости одного метода переноса граничных условий // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2006. Т. 46, № 3. С. 401–406.

УДК 524.82

Уточненные космологические ограничения, полученные с использованием новой калибровки масштаба масс скоплений галактик

А.Р. Ляпин, Р.А. Буренин

Институт космических исследований РАН

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Неопределенность в измерениях функций масс скоплений галактик является одной из основных неопределенностей, которую необходимо учитывать при расчетах ограничений на космологические параметры. Ранее мы получили новую калибровку масштаба масс ΔM с неопределенностью δM (табл. 1) для рентгеновских измерений масс скоплений по данным обсерватории Чандра [1, 2] и масс соответствующих скоплений, измеренных с помощью сигнала слабого гравитационного линзирования [3, 4]. Однако далеко не для всех скоплений из [1, 2] существуют прямые измерения слабого гравитационного линзирования. Поэтому для таких скоплений рентгеновские измерения и измерения по слабому гравитационному линзированию сравнивались не напрямую, а через измерения масс скоплений из второго каталога обзора всего неба обсерватории имени Планка [5].

Известно, что из нормировки функции масс скоплений на $z \approx 0$ можно получить следующее космологическое ограничение $\sigma_{8,0}$ со статистической неопределенностью $\delta\sigma_{8,0}$ на параметры σ_8 и Ω_M :

 $\sigma_8 = (\sigma_{8,0} \pm \delta \sigma_{8,0}) \times \left(\frac{\Omega_M}{0.25}\right)^{-0.47},$

где для $\sigma_{8,0}$ и $\delta\sigma_{8,0}$ в работе [6] были получены следующие значения: $\sigma_{8,0} = 0.813$ и $\delta\sigma_{8,0} = 0.013$. Можно показать, используя новую калибровку масштаба масс, что при систематической недооценке масс скоплений в рентгеновских измерениях на величину $1-\Delta M = 0,06$ с неопределенностью $\delta M = 0,06$ (табл. 1) значения $\sigma_{8,0}$ и $\delta \sigma_{8,0}$ будут составлять $\sigma_{8,0} = 0,828$ и $\delta \sigma_{8,0} = 0,014$ соответственно. Это уточненное космологическое ограничение в качестве первого приближения было использовано нами в дальнейшем для вычисления правдоподобия, которое было включено в расчет марковских цепочек. На рис. 1 представлены первые уточненные ограничения на σ_8 и Ω_M с использованием данных по рентгеновским измерениям масс скоплений галактик и данных Планка по температурному спектру мощности с обрезанными мультиполями выше $l_{max} = 1000$.

В дальнейшем планируется исследовать ограничения на другие наборы космологических параметров, используя полную функцию правдоподобия для всех данных, представленных в работах [2, 6].

Таблица 1

Калибровка масштаба масс для рентгеновских измерений скоплений телескопом Чандра

и скоплений, измеренных способом слабого гравитационного линзирования



Рис. 1. Уточненные ограничения на космологические параметры σ_8 и Ω_M

Литература

- Vikhlinin A., Kravtsov A., Forman W., Jones C., Markevitch M., Murray S. S., Van Speybroeck L. Chandra Sample of Nearby Relaxed Galaxy Clusters: Mass, Gas Fraction, and Mass-Temperature Relation // The Astrophysical Journal. 2006. V. 640. P. 691–709.
- 2. Vikhlinin A., Burenin R.A., Ebeling H., Forman W.R., Hornstrup A., Jones C., Kravtsov A.V.,

Murray S.S., Nagai D., Quintana H., Voevodkin A. Chandra Cluster Cosmology Project. II. Samples and X-Ray Data Reduction // The Astrophysical Journal. 2009. V. 692. P. 1033–1059.

- Hoekstra H., Herbonnet R., Muzzin A., Babul A., Mahdavi A., Viola M., Cacciato M. The Canadian Cluster Comparison Project: detailed study of systematics and updated weak lensing masses // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. 2015. V. 449. P. 685–714.
- Applegate D.E., von der Linden A., Kelly P.L., Allen M.T., Allen S.W., Burchat P.R., Burke D.L., Ebeling H., Mantz A., Morris R.G. Weighing the Giants – III. Methods and measurements of accurate galaxy cluster weak-lensing masses // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. 2014. V. 439. P. 48–72.
- 5. *Planck Collaboration* Planck 2013 results. XXIX. The Planck catalogue of Sunyaev-Zeldovich sources // Astronomy & Astrophysics. 2014. V. 571. A29.
- Vikhlinin A., Kravtsov A.V., Burenin R.A., Ebeling H., Forman W.R., Hornstrup A., Jones C., Murray S.S., Nagai D., Quintana H., Voevodkin A. Chandra Cluster Cosmology Project III: Cosmological Parameter Constraints // The Astrophysical Journal. 2009. V. 692. P. 1060–1074.

УДК 52-54

Частота слияний экзопланет со звёздами, вызванных приливной эволюцией

А.В. Попков¹, С.Б. Попов²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Государственный астрономический институт им. П.К. Штернберга

Первые планеты, обращающиеся вокруг других звёзд, иначе называемые экзопланетами, были открыты около 20 лет назад [1]. К настоящему времени существует около 3500 подтверждённых открытий и более 10000 кандидатов. Статистический анализ популяции известных планет показывает, что в среднем у каждой звезды есть одна или несколько планет [2]. Это делает актуальными различные исследования, касающиеся экзопланет.

Одним из важных вопросов в этой области является эволюция планет, то есть их формирование и дальнейшая судьба. После окончания процесса формирования планетной системы орбиты планет остаются в большинстве случаев достаточно устойчивыми. Однако постепенные изменения орбитальных параметров всё же могут происходить благодаря взаимодействию планет друг с другом, влиянию второй звёздной компоненты в двойных системах и другим процессам. Для близких же к звёздам планет наибольшую роль играет приливное взаимодействие.

Наблюдения показывают, что значительная доля экзопланет расположена на расстояниях меньше 0,1 а.е. от своих звёзд и имеет периоды обращения порядка десятков и даже нескольких дней [2]. Приливы, вызываемые такими планетами на звёздах (и звёздами на этих планетах), из-за неупругости вещества приводят к обмену моментом импульса между звездой и планетой и к диссипации энергии. В результате этого уменьшаются большая полуось и эксцентриситет орбиты, происходит синхронизация вращения планеты с её обращением вокруг звезды. Конечным результатом такого взаимодействия может быть падение планеты на звезду [3].

В работе [4] были изучены возможные сценарии слияний планет со звёздами. Согласно их результатам, если $\rho_p / \rho_* > 5$, где ρ_p – средняя плотность планеты, ρ_* – средняя плотность звезды, то планета достигает поверхности звезды неразрушенной (назовём этот случай «столкновением»). При этом сначала наблюдается транзиент в ультрафиолетовом и/или мягком рентгеновском диапазонах с пиковой светимостью < 10^{36} эрг/с. Недели или месяцы спустя видна оптическая вспышка, пиковая светимость которой для планет массы Юпитера составляет 10^{37} – 10^{38} эрг/с, а продолжительность – несколько дней. При $1 < \rho_p / \rho_* < 5$ происходит приливное разрушение планеты в аккреционный диск, что также сопровождается оптическим транзиентом длительностью до месяцев с пиковой светимостью до 10^{37} – 10^{38} эрг/с. Наконец, если средняя плотность планеты в с планеты на звезду без существенного увеличения светимости последней. Данные результаты означают, что в первых двух случаях слияния являются потенциально наблюдаемыми. В связи со строительством новых, более мощных обзорных телескопов, предсказание частоты данных вспышек представляет интерес.

Авторы [4] сделали простую оценку частоты слияний планет со звёздами и получили значение 0,1–1 слияний в год в Галактике. В данной работе предпринят расчёт темпа слияний на основе более детальной модели.

Расчёт производился по методу популяционного синтеза [5]. В данной работе он был применён следующим образом. Приливная эволюция орбиты рассчитывалась (в приближении круговых орбит и статических приливов) для $N = 10^7$ систем планетазвезда. Начальные параметры систем: масса звезды M_* , масса M_n и начальный радиус a_0 орбиты планеты – генерировались по методу Монте-Карло в соответствии с заданными распределениями. В качестве начального распределения M_n и a_0 были взяты результаты моделирования процесса формирования планетных систем [6]. Данный подход был реализован впервые. На основании расчётов для N систем строились распределения вероятности различных типов слияний планет со звёздами от возраста звёзд. Затем вычислялась свёртка этих распределений с зависимостью темпа звездообразования в Галактике от времени, начиная с момента её образования. В результате получена частота слияний различных типов (столкновений, приливных разрушений, стабильных перетеканий) в Галактике в настоящий момент. Помимо слияний с нормальными звёздами (звёздами главной последовательности диаграммы Герцшпрунга-Рассела), рассматривались и поглощения планет расширяющимися звёздами-гигантами. Такие события происходят на порядки чаще, чем падения планет на звёзды главной последовательности, но не приводят к наблюдаемым вспышкам из-за низкой плотности гигантов.

Вычисленные частоты различных типов слияний приведены в табл. 1. На рис. 1 показано распределение по светимости тех слияний, которые приводят к оптическим вспышкам. Частота наиболее ярких из них, со светимостью $10^{37.5}-10^{38}$, составляет примерно 0,003 в год в Галактике. Эти, хотя и редкие, события могут наблюдаться строящимся телескопом LSST на расстояниях до нескольких мегапарсек.

Таблица 1

Эволюционная стадия звезды	Столкновения	Приливные	Стабильные
		разрушения	перетекания
Главная последовательность	$2,2\cdot 10^{-2}$	$2,9 \cdot 10^{-3}$	8,0.10-4
После главной	2,70	3,6.10-4	1,7.10-6
последовательности			
Bcero:	2,72	$3,2\cdot 10^{-3}$	8,0.10-4

Частота слияний различных типов в галактике, подобной нашей. Единица измерения [год⁻¹]



Рис. 1. Распределение по светимостям слияний планет и звёзд в галактике, подобной Млечному Пути. По оси ординат отложено количество слияний в год в галактике в данном интервале светимостей. Штриховкой обозначены типы слияний – столкновения (direct impact) и приливные разрушения (tidal disruption). См. объяснение терминов в основном тексте

- 1. Mayor M., Queloz D. A Jupiter-mass companion to a solar-type star // Nature. 1995. V. 378. P. 355.
- 2. Winn J.N., Fabricky D.C. The Occurrence and Architecture of Exoplanetary Systems // Annual Review of Astronomy and Astrophysics. 2015. V. 53. P. 409.
- 3. *Teitler S., Koenigl A.* Why is there a Dearth of Close-in Planets around Fast-rotating Stars? // Astrophysical Journal. 2014. V. 786. Article id. 139.
- 4. *Metzger B.D., Giannos D., Spiegel D.S.* Optical and X-ray transients from planet-star mergers // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. 2012. V. 425. P. 2778.
- 5. Попов С.Б., Прохоров М.Е. Популяционный синтез в астрофизике // УФН. 2007. Т. 177. С. 1179.
- 6. *Alibert Y.* [*et al.*]. Theoretical models of planetary system formation: mass vs. semi-major axis // Astronomy & Astrophysics. 2013. V. 558. Id. A109.

Секция лазерных систем и структурированных материалов

УДК 538.91 (538.956 и 538.958)

Терагерцовая-инфракрасная спектроскопия энергетических состояний подсистемы молекул H₂O в кристаллах кордиерита

3.В.Бедрань¹, М.А. Белянчиков¹, Е.С. Жукова¹, В.Г. Томас², Е. Симчук¹, Б.П. Горшунов¹

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева РАН

Известно, что в условиях локализации на микро- или наномасштабах вода может приобретать свойства, качественно отличные от свойств обычной жидкой воды. Такие ситуации возникают во множестве искусственных и естественных систем: биологических, химических, физических, метеорологических, геологических и т. д. Новые свойства коллектив молекул H₂O приобретает благодаря уменьшению роли межмолекулярных водородных связей и возросшему влиянию сцепления водяных молекул с ограничивающими поверхностями. Свойства подобных систем на настоящее время практически не исследованы. Модельными объектами для подобных исследований являются диэлектрики, кристаллическая решетка которых содержит наноразмерные поры, внутри которых располагаются *единичные* молекулы H₂O. Варьирование расстояния между молекулами (различные диэлектрики, различная степень заполнения пор) предоставляет богатые возможности для изучения природы коллективных и одночастичных возбуждений подсистемы молекул H₂O. Так, в работе [1] на примере водосодержащих кристаллов берилла нам впервые удалось реализовать условия, в которых отдельные молекулы воды оказались способными эффективно взаимодействовать посредством диполь-дипольных связей в условиях практически полного подавления водородных связей: расстояние между порами (5–10 Å) в кристалле достаточно велико, чтобы водородные связи были подавлены, но не слишком большое, чтобы диполь-дипольное взаимодействие оставалось существенным. С применением метода радио- и терагерцовой спектроскопии нами наблюдалось возникновение (потенциального) сегнетоэлектрического состояния в подсистеме молекул воды. Состояние с макроскопической электрической поляризацией оказалось подавлено, предположительно из-за недостаточно сильной корреляции между молекулами воды либо благодаря гексагональной симметрии кристалла и соответствующего отсутствия выделенного направления для диполей молекул воды.

Целью настоящего исследования является попытка реализации реального сегнетоэлектрического состояния в водосодержащем кристалле кордиерита, структурно весьма близкого к бериллу. В отличие от берилла, однако, кристаллическая решетка кордиерита характеризуется орторомбической симметрией. Как следствие, в подсистеме наноразмерных пор, содержащих молекулы воды, существует выделенное направление, и этот факт может «спровоцировать» дипольные моменты молекул воды сориентироваться в одном направлении, т. е. способствовать возникновению макроскопического сегнетоэлектрического основного состояния.

С применением методов терагерцовой и инфракрасной спектроскопии нами выполнены первые детальные измерения диэлектрических спектров природного (метаморфических пород Южно-Чуйского хребта, Горный Алтай, Россия) кристалла кордиерита, при температурах от гелиевой (5 К) до комнатной, в диапазоне частот от 3 до 8000 см⁻¹. Впервые получены детальные *фононные* спектры кордиерита для трёх поляризаций.

В инфракрасной области обнаружен богатый набор линий поглощения, связанный с известными внутримолекулярными колебаниями v ($\approx 3600 \text{ cm}^{-1}$), v2 ($\approx 1600 \text{ cm}^{-1}$), v3 ($\approx 3800 \text{ cm}^{-1}$) молекул H₂O и с их комбинациями с более низкочастотными водяными колебаниями. На основе спектральных измерений на приготовленных обезвоженных

кристаллах выделены линии поглощения, связанные исключительно с колебаниями нанолокализованных молекул воды. В терагерцовой области частот, ниже 100 см⁻¹, обнаружены резко анизотропные и температурно-неустойчивые линии поглощения, проявляющиеся в поляризациях Е||а и Е||b и отсутствующие в поляризации Е||с (Е – вектор электрического поля излучения). Установлено, что в поляризации Е||а температурное поведение низкочастотной диэлектрической проницаемости описывается формулой Барретта для потенциальных сегнетоэлектриков, что свидетельствует в пользу того, что обнаруженные температурно-неустойчивые терагерцовые линии поглощения представляют собой сегнетоэлектрические мягкие моды.



Рис. 1. Кристаллическая решётка кордиерита. Возможные вакансии лёгких элементов – крупные сферы по центру силикатных колец. Каналы с наноразмерными порами, содержащими молекулы H₂O, направлены вдоль оси с

Авторы благодарят С.3. Смирнова за предоставленные кристаллы кордиерита. Работа выполнена при поддержке программы «5-100», проекта № 3.9896.2017/ВУ и гранта визит-профессоров МФТИ.

Литература

1. *Gorshunov B.P.* [*et al.*]. Incipient ferroelectricity of water molecules confined to nano-channels of beryl // Nat. Commun. 2016. 7:12842 doi: 10.1038/ncomms12842 (2016).

УДК 535-31

Генерация высоких гармоник в интенсивных двухцветных лазерных полях

В.А. Бируля¹, В.В.Стрелков²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

В данной работе численно исследовалась генерация гармоник высоких порядков (ГГВП) в двухцветных полях (лазерное поле с добавлением его второй гармоники). В качестве среды взаимодействия с лазерным излучением предполагался сильно разреженный газ ксенона.

Для расчётов использовались две теории: полуклассическая и квантовомеханическая. В полуклассической модели [1, 2] рассматривается отдельный атом, не учитываются макроскопические эффекты (эффекты распространения). В соответствии с этой моделью ГГВП происходит в три стадии: сначала под действием сильного лазерного поля электрон туннелирует через потенциальный барьер (ионизация); далее происходит движение электрона в электромагнитном поле лазера; затем электрон возвращается обратно к иону, рекомбинируя и испуская фотон с энергией. равной сумме энергии ионизации и кинетической энергии, приобретённой электроном во время движения в континууме.

Движение электрона в лазерном поле можно грубо считать классическим и описывать уравнением Ньютона: $m\ddot{x} = -eE(t)$, где m, e – масса и заряд электрона, x – его координата, t – время, E(t) – амплитуда электрического двухцветного поля $E(t) = E_0(\cos(\omega t) + a\cos(2\omega t + \varphi))$ с частотой и амплитудой основного поля ω и E_0 соответственно, отношением амплитуд поля второй гармоники к первой a, и относительной фазой φ . Надо учесть условия $x(t_i) = \dot{x}(t_i) = x(t_r) = 0$, где t_r – время рекомбинации, t_i – время ионизации. Таким образом, была рассчитана зависимость кинетической энергии рекомбинирующего электрона от времени ионизации при различных параметрах a и φ . В этой зависимости для двуцветного поля при некоторых параметрах появляется область, где кинетическая энергия постоянна в некотором интервале времен ионизации (эффект каустики), следовательно, в этом интервале будут испускаться фотоны с одной частотой, что ведёт к увеличению интенсивности определённой гармоники (рис. 1).

Также численно решалось трёхмерное нестационарное уравнение Шредингера [3] для электрона атома ксенона в поле (использовалась атомная система единиц $e = m = \hbar = 1$):

$$i\dot{\Psi}(r,z,t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2} + V(r,z) + E(t)z\right)\Psi(r,z,t)$$

Уравнение записано в цилиндрических координатах, где r – полярный радиус, z – координата вдоль направления электрической напряжённости, E(t) – напряженность электрического поля падающей волны, \hat{p} – оператор импульса, $V(r,z) = (b^2 + r^2 + z^2)^{-1/2}$ – сглаженный кулоновский потенциал. Параметр b в потенциале помогает обойти бесконечность при r = z = 0.

Были численно получены зависимости интенсивности гармоник от их номера. На рис. 2 представлена такая зависимость при a = 0,55 и $\varphi = -1,0$. Можно заметить, что гармоники 41–44 на порядок выше соседних, т. е. эффективная генерация идёт выделенной группы гармоник. С точки зрения полуклассической теории частота этих гармоник лежит в области постоянной кинетической энергии. На рис. 3 показана суммарная интенсивность 41–49 гармоник при различных параметрах двухцветного поля. Легко видеть, что при параметрах поля a = 0,44 и $\varphi = -1,1$ эффективность генерации 41–49 гармоник максимальна.

Итак, в данной работе с помощью численного решения уравнения Шредингера найдены параметры генерирующего поля, при которых имеется выраженный максимум в эффективности генерации группы гармоник высокого порядка. Наличие этого максимума связано с эффектом каустики, который имеет наглядное объяснение в рамках полуклассической модели генерации высоких гармоник.



Рис. 1. Зависимость кинетической энергии электрона от времени его ионизации в двуцветном поле при а) a = 0.45, $\varphi = -1.04$; б) a = 0.65, $\varphi = -0.6$. По оси абсцисс отложено произведение времени ионизации t_i на частоту поля, по оси ординат – отношение кинетической энергии возвращающегося $e^2 F^2$





Рис. 2. Зависимость интенсивности гармоники от её номера при двухцветном падающем поле с длиной волны основного поля $\lambda = 1,52$ мкм, параметрами a = 0,55 и $\varphi = -1,0$ и интенсивностью основной гармоники, равной $0.5 \cdot 10^{14}$ Вт/см². Шкала интенсивности в логарифмическом масштабе



Рис. 3. Зависимость суммарной интенсивности 41–49 гармоник от параметров падающего поля *a* и φ с длиной волны основного поля $\lambda = 1,52$ мкм и интенсивностью основной гармоники, равной $0.5 \cdot 10^{14}$ BT/cm². Заштрихованными областями показана суммарная интенсивность в отн. ед.

- 1. Burnett N.H., Corkum P.H. // JOSA B. 1989. N 6. P. 1195.
- 2. Corkum P.H., Burnett N.H., Brunell F. // Phys. Rev. Lett. 1989. N 62. P. 1259.
- Strelkov V.V., Sterjantov A.F., ShubinN.Yu., Platonenko V.T. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2006. N 39. P. 57.

УДК 537.9

Аномальный эффект Холла в парамагнитной фазе антиферромагнетика Но_{0.8}Lu_{0.2}B₁₂

К.М. Красиков¹, В.В. Глушков^{1,2}, С.В. Демишев^{1,2}, В.Н. Краснорусский², Н.Ю. Шицевалова³, В.Б. Филипов³, А.Л.Хорошилов^{1,2}, Н.Е. Случанко²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН ³Институт проблем материаловедения им. И.М. Францевича НАНУ

Обычно возникновение максимума коэффициента Холла $R_H(T)$ в системах с тяжелыми фермионами связывают с переходом от режима асимметричного рассеяния носителей заряда (skew scattering) на магнитных центрах к когерентному режиму зарядового транспорта [1–2]. Подобная особенность $R_H(T)$ наблюдается и в твердых растворах замещения Ho_xLu_{1-x}B₁₂ с переходом в фазу каркасного стекла при $T^* \sim 60$ K (см., например, кривую $R_H(T)$ для состава с x = 0,8 на рис. 1).

С целью выяснения природы указанной холловской аномалии в работе в широком интервале температур T = (2,1-40) К в магнитном поле до 80 кЭ методом вращения образца были выполнены измерения удельного и холловского сопротивления монокристаллических образцов $Ho_{0.8}Lu_{0.2}B_{12}$ высокого качества.

На рис. 1 показана температурная зависимость холловского сопротивления, полученная при измерениях на образце $Ho_{0.8}Lu_{0.2}B_{12}$ в конфигурации $H \parallel [100]$ в поле H = 80 кЭ. Черные точки отвечают стандартной схеме измерений, когда для расчетов эффекта Холла используется сигнал с холловских контактов в двух противоположных направлениях поля $H \parallel [100]$ и $H \parallel [-100]$.

В качестве примера измеренной в работе угловой зависимости холловского сопротивления на рис. 2 представлена кривая $\rho_{xy}/H = f(\varphi)$ (φ – угол между вектором
нормали **n** и **H**, см. вставку на рис. 2). Как видно из рис. 2, на угловых зависимостях холловского сопротивления в парамагнитной фазе в координатах $\rho_{xy}/H = f(\varphi)$ наряду с ожидаемой зависимостью вида $\rho_{xy}/H = \rho_{xy}^0/H * \cos(\varphi)$, в $\text{Ho}_{0.8}\text{Lu}_{0.2}\text{B}_{12}$ также присутствует дополнительный, аномальный вклад $\Delta \rho_{xy}$, компенсирующий амплитуду эффекта Холла. В предположении, что в окрестности нулей холловского сигнала (углы 90 и 270 градусов, см. рис. 2) угловая зависимость $\rho_{xy}/H = f(\varphi)$ близка к косинусоидальной, нами были получены амплитуда нормального вклада в эффект Холла и величина аномального вклада $\Delta \rho_{xy}(\varphi) = \rho_{xy}(\varphi) - \rho_{xy}^0 * \cos(\varphi)$, представленная в координатах $\Delta \rho_{xy}/H = f(\varphi)$ на рис. 3.

Открытые символы (рис. 1) соответствуют амплитуде, полученной путем аппроксимации холловского сопротивления косинусоидальной зависимостью, которая является нормальной компонентой $R_H(T, H)$ в эффекте Холла.

Как видно из рис. 3, аномальная компонента $\Delta \rho_{xy}(\varphi)$ возникает при температурах ниже 40 К и увеличивается с понижением температуры. Отметим также, что амплитуда нормального вклада $R_H(T)$ монотонно возрастает при понижении температуры в интервале T < 40 К (см. рис. 1) и, таким образом, максимум на кривой $R_H(T)$ не наблюдается.

Далее, для выяснения природы аномального вклада в ρ_{xy} , в работе проанализировано изменение удельного сопротивления от температуры в поле H = 80 кЭ для различных направлений магнитного поля относительно кристаллографических осей **H**||[110], **H**[[111], рис. 4). Найдена анизотропная составляющая (**H**||[001], магнетосопротивления $\Delta \rho_1(T) = \rho[001] - \rho[110]$ и $\Delta \rho_2(T) = \rho[001] - \rho[111]$, и из анализа кривых $\Delta \rho_{12}(T)$ определена энергия активации анизотропного вклада в магнетосопротивление $\Delta E/k_{\rm F} = 24,4$ К. Сопоставление поведения аномальных вкладов $\Delta \rho_{xv}(T)$ и $\Delta \rho_{12}(T)$ позволяет предположить, что анизотропия зарядового транспорта в Нообусловлена динамическим кооперативным эффектом $_{0.8}Lu_{0.2}B_{12}$ Яна-Теллера, обнаруженным в [3] в LuB₁₂.



Рис. 1. Температурная зависимость холловского сопротивления ρ_{xy}/H , полученная при H = 80 кЭ для $H \parallel [100]$ в стандартной схеме измерений (exp) и с помощью аппроксимации косинусоидальной зависимостью (cos)



Рис. 2. Угловая зависимость холловского сопротивления при T = 5,4 K и H = 80 кЭ



Рис. 3. Разность $\Delta \rho_{xy}/H = f(\varphi)$ между измеренной и аппроксимированной косинусом зависимостями в эффекте Холла



Рис. 4. Зависимость удельного сопротивления *ρ* от угла *φ* между нормалью к образцу и направлением магнитного поля

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РНФ № 17-12-01426.

- 1. *Hadzic-Leroux M., Hamzic A. and Fert A.* Hall Effect in Heavy-Fermion Systems: UPt₃, UAl₂, CeAl₃, CeRu₂Si₂ // Europhys. Lett. 1986. 1 (11). P. 579–584.
- 2. Coleman P., Anderson P.W. and R T.V. Theory for the Anomalous Hall Constant of Mixed-Valence Systems // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 55, N 4.
- 3. arXiv:1707.06516 [cond-mat.str-el]

УДК 548.75

Терагерцовая спектроскопия монокристаллического гексагонального феррита М-типа ВаТі_{0.6}Fe_{11.4}O₁₉

С.Р. Егиян¹, Л.Н. Алябьева¹, В.И. Торгашев², Е.С. Жукова¹, Д.А. Винник³, С.А. Гудкова^{3,4}, А.С. Прохоров^{1,5}, Б.П. Горшунов¹

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Южный федеральный университет ³Южно-уральский государственный университет ⁴Научно-образовательный центр «Нанотехнологии», Московский физико-технический

институт (государственный университет)

⁵Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Гексаферритами М-типа называются соединения вида МFe₁₂O₁₉, где в качестве катиона М могут выступать ионы Ba, Pb, Sr и т.д. На сегодняшний день их активно используют в качестве постоянных магнитов, в микроволновых приборах, в магниторезистивных датчиках, в радиочастотных фильтрах и в устройствах магнитной памяти. Кристаллы представляют интерес в связи со своей анизотропией и значительным магнитоэлектрическим эффектом при комнатной температуре и относительно небольших значениях внешнего магнитного поля (~ 0.01 Тл) [1]. При изучении физических свойств гексаферритов особое внимание уделяется влиянию легирования на их электромагнитные свойства.

Гексаферриты М-типа представляют собой оптически непрозрачные кристаллы слоистой структуры. Ионы Fe³⁺ занимают пять различных позиций в кристаллической решетке: три в октаэдрах (2a, 4f₁, 12k), одну в тетраэдре (4f₂) и одну в пятикоординационной бипирамиде (2b). Последняя позиция не стабильна: ион Fe³⁺ в бипирамиде может находиться в трех различных положениях динамически осциллируя вдоль оси *с* при комнатной температуре [2]. Структурные характеристики, в том числе: длины связей, параметры кристаллического поля и т.д. примесного кристалла зависят от свойств замещающих ионов и их концентрации. При легировании структуры ионы титана Ti⁴⁺ встраиваются только в три кристаллографические позиции: октаэдры 2a, тетраэдры 4f₂ и бипирамиды 2b в соотношении 2 : 2 : 1.

В данной работе впервые было проведено исследование монокристалла ВаТі_{0.6}Fe_{11.4}O₁₉ методами терагерцовой и инфракрасной спектроскопии. Измерения спектра пропускания в терагерцовом диапазоне (разрешение 1 см⁻¹) были проведены с использованием спектрометра временного разрешения «Teraview TPS Spectra 3000» в пределах от 10 до 60 см⁻¹. Спектры отражения с разрешением 2 см⁻¹ в дальней и средней инфракрасной области (50-8000 см⁻¹) выполнены с использованием стандартного инфракрасного Фурье-спектрометра «Bruker Vertex 80v» с микроскопной приставкой «Hyperion 2000». Для исследования из цельного монокристалла была вырезана и отполирована плоскопараллельная пластина 3 × 5 мм толщиной 168 ± 1 мкм с кристаллографической осью с, лежащей в плоскости пластинки, что позволило произвести оптические измерения в двух принципиальных поляризациях. На рис. 1 представлены результаты обработки спектров по методу наименьших квадратов с использованием Лорентцианов для описания наблюдаемых резонансов. В области высоких частот присутствует богатый набор фононных линий поглощения. В области от 10 до 80 см⁻¹

наблюдаются линии поглощения, природа которых нами связывается с совокупным вкладом фононов с магнонами.

Титан находится в четвертом периоде четвертой группы периодической системы элементов, в то время как железо в восьмом. Вследствие меньшей массы ионов титана, в легированном кристалле решеточные колебания будут возбуждаться при более низких энергиях. Кроме того, эффективный ионный радиус Ti⁴⁺ также меньше радиуса Fe³⁺; например, в бипирамидальной позиции они равны 0,53 Å и 0,58 Å соответственно. Исходя из данных соображений можно предположить, что линии поглощения в исследованном кристалле с примесью ионов титана должны сдвинуться в низкочастотную область спектра по сравнению с линиями в чистом бариевом гексаферрите [2], что и наблюдается экспериментально.

В докладе представлен детальный анализ природы обнаруженных линий поглощения.



Рис. 1. Спектры отражения (a), пропускания (b) и комплексной диэлектрической проницаемости (c, d) монокристаллического гексагонального феррита М-типа BaTi_{0.6}Fe_{11.4}O₁₉ при комнатной температуре

Данная работа проведена при поддержке Министерства образования Российской Федерации (программа 5топ100).

- 1. Kimura T. Magnetoelectric Hexaferrites // Ann. Rev. Condens. Matter Phys. 2012. V. 3. P. 93-110.
- 2. *Mikheykin A.S.* [*et al.*]. Lattice anharmonicity and polar soft mode in ferromagnetic M-type hexaferrite BaFe₁₂O₁₉ single crystal // The European Physical Journal. 2014. P. 1–2.

УДК 535.015

Приповерхностная фемтосекундная запись треков с индуцированным показателем преломления в кристалле ниобата лития

Н.Н. Скрябин^{1,2}, М.А. Бухарин^{1,2}, Д.В. Худяков³

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²ООО «Оптосистемы»

³ Центр физического приборостроения Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН

В настоящее время фемтосекундная запись является перспективной безмасочной технологией создания трехмерных волноводов внутри оптических стекол и кристаллов, а также широкого класса оптических интегральных устройств на их основе [1]. Одним из важнейших направлений этой технологии является запись волноводов вблизи поверхности кристалла ниобата лития (LiNbO₃) для создания электрооптических модуляторов с малым полуволновым напряжением.

Вблизи поверхности кристалла ниобата лития *х*-среза были записаны одиночные протяженные треки (II типа) с помощью стандартной ортогональной схемы фемтосекундной записи. В качестве источника ультракоротких импульсов использовался лазер HighQ FemtoTRAIN, с длиной волны 1040 нм, длительностью импульса 360 фс, энергией импульсов до 350 нДж, частотой следования 0,1 МГц. Для предотвращения абляции и разрушения поверхности образца была уменьшена интенсивность излучения на поверхность материала путем использования иммерсионного фокусирующего микрообъектива с большой числовой апертурой (NA = 1,25) с дистиллированной водой (n = 1,32) вместо иммерсионного масла, который мог привести к сильному нагреву выходной плоскости объектива и его деформации. Вода же, в отличие от иммерсионного масла, в случае превышения порога пробоя не образует продуктов горения, а испаряется, не загрязняя объектив и не приводя к существенному нагреву.

В результате исследования была получена диаграмма энергий в зависимости от глубины для записи вблизи поверхности ниобата лития (рис. 1). Минимальная возможная глубина записи при этом составила 2 мкм. Каждый индуцированный трек имел размеры поперечного сечения $(1-1,5) \times (2,5-4)$ мкм, а индуцированный показатель преломления имел значение до -3×10^{-3} . При меньших глубинах (< 2 мкм) наблюдается разрушение поверхности образца и отсутствие возможности записи треков с индуцированным п/п. Оно связано с понижением порога оптического пробоя поверхности по отношению к порогу пробоя объема материала, а также высокими температурными градиентами, обуславливающими существенные механические напряжения внутри фокального пятна.

Используя полученную диаграмму были записаны одномодовые волноводы с лепрессированной оболочкой с лиаметром 12 мкм, которые состояли из нескольких рядов параллельных треков, как показано на рис. 2. Волноводы располагались на глубинах от 2 мкм до 20 мкм (расположение границ сердцевины от 5 до 17 мкм). Такие волноводы поддерживают любое линейное состояние поляризации, и величина потерь на распространение находится на уровне 1,5 дБ/см для горизонтальной поляризации и 1,8 дБ/см – для вертикальной. Разница в потерях на распространение на уровне 0,3 дБ по сравнению с более чем 1 дБ в работах [2,3] говорит о высоком уровне однородности оболочки волноводов И возможности ИХ дальнейшего использования лля неинтерференционных электрооптических модуляторов на основе эффекта электро-И использования схемы оптического вращении поляризации скрещенных поляризаторов. Малая глубина залегания фемтосекундно-записанных волноводов, полученная впервые в данной работе, позволяет использовать их с поверхностнонанесенными электродами в отличие от ранее используемых, сложных в изготовлении заглубленных электродов для волноводов на больших глубинах залегания под поверхностью кристалла (более 15 мкм) [4].



Рис. 1. Рабочий диапазон для записи на поверхности ниобата лития. Квадратными точками отмечена верхняя граница рабочего диапазона с перманентным изменением п/п, круглыми – нижняя. Выше верхней горизонтальной пунктирной линии возникает оптический пробой объема материала, вблизи поверхности при высоких энергиях – разрушение



Рис. 2. Фотография волновода с депрессированной оболочкой на поверхности ниобата лития (вид с торца кристалла)

Работа была поддержана Фондом содействия инновациям (Программа У.М.Н.И.К., 8611ГУ/2015 №0018824).

- 1. Femtosecond Laser Micromachining / ed. by R. Osellame, R. Ramponi, G. Cerullo. London: Springer-Verlag, 2012. 481 c.
- Kroesen S., Horn W., Imbrock J. [et al.]. Electro-optical tunable waveguide embedded multiscan Bragg gratings in lithium niobate by direct femtosecond laser writing // Optics Express. 2014. V. 22, N 19. P. 23339–23348.
- 3. Li R., Nie W., Lu Q. [et al.]. Femtosecond-laser-written superficial cladding waveguides in Nd:CaF2 crystal // Optics & Laser Technology. 2017. V. 92. P. 163–167.
- 4. *Liao Y., Xu J., Cheng Y. [et al.*]. Electrooptic integration of embedded electrodes and waveguides in LiNbO3 using a femtosecond laser // Optics Letters. 2008. V. 33, N 19. P. 2281.

УДК 533.922

Исследование процесса лазерной генерации водорода в органических жидкостях

И.В. Баймлер¹, Е.В Бармина², А.В. Симакин², Г. А. Шафеев²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Лазерная абляция твердых тел в жидкостях – это один из способов генерации химически чистых наночастиц [1]. При последующем воздействии инфракрасного лазерного излучения на коллоидные растворы наночастиц возможно образование плазмы в области перетяжки пучка вокруг отдельных наночастиц. Если интенсивность падающего излучения достаточна для достижения наночастицей температур $10^4 - 10^5$ K, то возможна ионизация части атомов. Когда концентрация электронов достигают критического значения, происходит образование плазмы, которая называется наноплазмой, благодаря своей локализации в небольшой области в окрестности наночастицы. При определенных экспериментальных условиях (высокая частота следования импульсов) возможно объединение плазменных факелов, возникающих на отдельных наночастицах. В таких случаях происходит лазерный пробой в жидкости. В результате в рабочей жидкости происходят изменения химического состава. Недавно было установлено [2], что при воздействии лазерного излучения на водные растворы наночастиц железа возможно образование молекулярного водорода. Он образуется из-за диссоциации воды под действием электронного удара, в случае, если энергия электронов составляет более 16 электронвольт.

В работе представлены результаты по генерации молекулярного водорода при взаимодействии лазерного излучения с жидкостями (вода, спирты) в присутствии наночастиц металлов. В качестве источника лазерного излучения использовался Nd:YAG лазер с длиной волны 1064 нм, длительностью импульса 10 нс, частотой повторений 8 кГц, средней мощностью до 20 Вт, энергией в импульсе 1,25 мДж. Лазерный пучок перемещался с помощью моторизированной системы зеркал с различной скоростью. В качестве жидкостей были использованы вода, полученная с помощью обратного осмоса: этанол, изопропанол, изобутанол и диэтиловый эфир.

При лазерной абляции водного раствора наночастиц бериллия было исследовано влияние скорости перемещения лазерного пучка на процесс генерации водорода. На рис.1 изображена зависимость скорости генерации водорода при облучении коллоидного раствора бериллия для различных скоростей перемещения пучка. Из анализа представленной зависимости можно сделать вывод, что максимальная скорость генерации водорода наблюдается при скорости перемещения лазерного пучка более 3000 мм/с. Все последующие эксперименты проводились при вышеуказанном параметре сканирования.

В работе также исследован процесс генерации молекулярного водорода при взаимодействии лазерного излучения с органическими жидкостями. В частности, по лазерной абляции этанола, изопропанола, изобутанола и диэтилового эфира. Зависимость выхода водорода для различных органических жидкостей от времени представлена на рис. 2. Было выяснено, что помимо водорода, в процессе реакции диссоциации выделяются гликоли, альдегиды, молекулярный кислород и перекись водорода.

На основе уравнения диффузии, была подобрана аппроксимация, описывающая изменение парциального давления молекулярного водорода в системе и, соответственно, процесса генерации, соответствующее экспериментальным данным. Также, исходя из молекулярной структуры взятых органических соединений, предложен механизм, объясняющий полученные экспериментальные данные.



Рис. 1. График зависимости скорости генерации водорода от скорости перемещения лазерного пучка



Рис. 2. График зависимости количества выделяемого водорода от времени лазерного воздействия на различные органические жидкости

- 1. Neddersen J., Chumanov G., Cotton T.M. // Appl. Spectrosc. 1993. 47. 1959.
- 2. Barmina E.V., Simakin A.V., Shafeev G.A. Hydrogen emission under laser exposure of colloidal solutions of nanoparticles // Chemical Physics Letters. 2016. V. 655–656. 35–38.

УДК 544.77.052.2

Влияние внешнего магнитного поля на морфологию наночастиц золота, полученных методом лазерной абляции в жидкости

К.О. Айыыжы^{1,2}, Е.В. Бармина^{1,2}, Г.А. Шафеев¹, И.И. Раков¹

¹ Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

В работе впервые представлены результаты по генерации удлиненных наночастиц золота при лазерной абляции массивной мишени в воде. Авторами [1–3] было показано, что внешнее магнитное поле влияет на структуру и динамику плазменного факела, а именно: увеличивается его светимость и скорости частиц, из которых он состоит. В настоящей работе установлено, что постоянное магнитное поле индукцией до 7 Тл может влиять на поведение диамагнитных наночастиц золота в жидкости, что приводит к их дальнейшему удлинению в нанонити. Это подтверждается изменением спектров экстинкции коллоидного раствора и изображениями, полученными на просвечивающем электронном микроскопе до и после действия магнитного поля. В зависимости от параметров эксперимента морфология образовавшихся наночастиц золота, полученных методом лазерной абляции в воде, различается (рис. 1).

Спектр экстинкции коллоидного раствора наночастиц 1 имеет пик в области 530 нм, что соответствует поперечному плазмонному резонансу сферических наночастиц золота. В коллоидах 2 и 3, помимо классических сферических частиц, при генерации образуются наночастицы удлиненной формы, что соответствует появлению плеча в красной области спектра, являющемуся суперпозицией продольных плазмонных резонансов наночастиц с различными отношениями полуосей (диаметра к длине) [4], т. е. осцилляциям электронов в направлении большей полуоси наночастиц. Можно заметить, что увеличение времени лазерной экспозиции приводит к преимущественному образованию сферических наночастиц. Это объясняется повышенной вероятностью вторичной экспозиции уже сформированных наночастиц золота лазерным пучком и их фрагментацией. Чем меньше толщина слоя жидкости над поверхностью мишени, тем ниже вероятность повторной экспозиции наночастиц лазерным пучком.

Полученные коллоиды удлиненных наночастиц золота в воде были помещены в постоянное магнитное поле, изменяемое от 0 до 7 Тл. В эксперименте по исследованию оптических свойств коллоидных растворов наночастиц золота в воде во внешнем постоянном магнитном поле было выявлено, что спектр экстинкции коллоидных растворов наночастиц золота меняется в зависимости от времени его нахождения в магнитном поле. А именно, это выражается в появлении и росте пика поглощения наночастиц в ближней ИК-области, как показано на рис. 3.

Изменение спектров экстинкции следует отнести к удлинению наночастиц золота и их объединению в нанонити, у которых продольный плазмонный резонанс расположен в ближней ИК-области, что и соответствует полученным спектрам. Наблюдаемая эволюция спектра экстинкции может быть объяснена на основе взаимодействия плазмонных колебаний электронов в магнитном поле. Плазмонные колебания электронов эквивалентны току очень высокой частоты. Такой ток создает свое собственное магнитное поле, которое взаимодействует с внешним магнитным полем. Предполагается, что основным механизмом влияния является сила Лоренца, действующая на наночастицы различной морфологии, в которых свободные электроны совершают осцилляции с частотой плазмонного резонанса. Распределение сферических наночастиц в магнитном поле остается неизменным, тогда как удлиненные наночастицы объединяются в нанонити.



Рис. 1. Спектры экстинкции коллоидных растворов наночастиц золота, полученных при различных условиях эксперимента. Параметры эксперимента: частота повторения импульсов 20 кГц, длительность импульса 80 нс, средняя мощность лазерного луча 20 Ватт. 1 – толщина слоя жидкости 1,28 мм, время экспозиции 1 мин; 2–2,25



Рис. 2. Схема экспериментальной установки по исследованию оптических свойств коллоидных растворов наночастиц золота в воде во внешнем постоянном магнитном поле. 1 – магнит, 2 – лампа накаливания, 3 – коллиматор, 4 – коллоидный раствор



Рис. 3. Изменение спектра экстинкции коллоидного раствора наночастиц золота в зависимости от времени нахождения во внешнем магнитном поле индукции 7 Тл

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ грантами 15-02-04510 а, 16-02-01054 а.

Литература

- 1. Kokai F., Koga Y., Heimann R.B. Magnetic field enhanced growth of carbon cluster ions in the laser ablation plume of graphite // Applied Surface Science. 1996. 261–266.
- 2. *Harilal S.S.* [*et al.*].. Confinement and dynamics of laser-produced plasma expanding across a transverse magnetic field // Physical Review. E. 2004. 69. 026413.
- 3. Tachiki M., Takeshi K. Manipulation of Laser Ablation Plume by Magnetic Field Application // Japanese Journal of Applied Physics. 1999. 38. 3642.
- 4. Chang S-S., Shih C-W., Chen C-D., Lai W-C., and Wang C. R. The Shape Transition of Gold Nanorods // Langmuir. 1999. 15. 701–709.

УДК 539.223

Адсорбция атома кремния на хлорированную поверхность Si(100)

Е.С. Скороходов^{1,2}, Т.В. Павлова², К.Н. Ельцов²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

В результате технологических достижений в области наноэлектроники, в настоящее время существуют полупроводниковые электронные устройства, в которых используются одиночные атомы (см. обзор [1] и цитированную там литературу), например транзистор на отдельном атоме [2]. Расположение примесей с точностью в несколько ангстрем не только напрямую влияет на характеристики таких устройств, но также имеет решающее значение для создания масштабируемого кремниевого квантового компьютера на ядерных спинах атомов фосфора [3]. Наиболее точным методом размещения атома в заранее выбранном месте является литография с использованием СТМ (сканирующего туннельного микроскопа). Очищенная поверхность кремния покрывается маской (монослоем из атомов водорода), далее в результате электронно-стимулированной десорбции зондом СТМ удаляется часть маски в выбранном месте, в которое затем внедряется фосфор [4]. Для того чтобы примесные атомы оказались в трехмерной решетке кристаллического кремния, проводится гомоэпитаксия кремния. Остается открытым вопрос, как удалить маску, и что происходит, если маску не удалять, а осаждать кремний на атомы водорода. При этом желательно избежать нагрева кремния до температур десорбции водорода, поскольку примеси при нагреве могут диффундировать. В настоящей работе обсуждается процесс удаления маски без нагрева образца до температур десорбции атомов, составляющих маску, с последующей эпитаксией кремния.

Мы исходим из недавно предложенного метода СТМ-литографии по маске из монослоя хлора [5], который позволяет расположить атомы фосфора на поверхности Si(100) с точностью в одну постоянную решетки кремния. Предлагается осаждать атомы кремния на маску из хлора, что, как показано в настоящей работе, приведет к обмену адсорбированного атома Si с атомом Cl и встраиванию атома Si в решетку кремния или образованию квазимолекулы SiCl₂, которая слабо связана с подложкой и может десорбироваться.

Адсорбция атома кремния (далее *адатома кремния*) на поверхность Si(100)2x1-Cl была изучена в рамках теории функционала плотности с использованием базиса плоских волн. Расчёты проведены в программном пакете VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) [6, 7]. Поверхность Si(100)2x1-Cl моделировалась периодически повторяющимися ячейками 4×4 , состоящими из восьми атомных слоев кремния. Нижняя поверхность была покрыта водородом для насыщения оборванных связей кремния, на верхней поверхности располагался монослой из атомов хлора.

В начале расчетов адатом кремния помещался на расстоянии 2,5 Å над монослоем хлора (рис. 1а). Рассмотрено семь различных вариантов начальных мест адсорбции адатома кремния: пять симметричных положений (положения 1-3, 6 и 7 на рис. 1б) и два положения, смещенных на 0,5 Å относительно симметричных положений (положения 4 и 5 на рис. 1б). Наиболее выгодная структура образуется при исходном несимметричном положении 5 на рис. 1б, когда в ходе релаксации координат адатома Si обменивается местами с ближайшим атомом Cl (рис. 1в). Длина связи адатома Si с атомом кремния подложки равна 2,50 Å, что близко к длине связи Si-Si в объемном кремнии (2,37 Å). Таким образом, адатом Si встраивается в решетку кремния, а атом хлора оказывается сверху.

В большинстве случаев (положения 1, 2, 4 и 6) в результате релаксации координат адатом кремния образует связи с двумя атомами хлора (рис. 1г). Длины связей варьируются от 2,03 Å до 2,25 Å, угол раствора между атомом Si и ближайшими атомами Cl – от 95° до 105°. Такая конфигурация из адатома Si и двух атомов Cl близка к структуре молекулы SiCl₂. Рассчитанные для свободной молекулы SiCl₂ длины связей Si-Cl составили 2,09 Å, угол раствора – 102°. Расстояния между атомами хлора, образующими квазимолекулу, и атомами Si подложки оказываются увеличены на 1,27 Å по сравнению с невозмущенными положениями и равны 3,32 Å. Поэтому мы считаем, что квазимолекула SiCl₂ достаточно слабо связана с поверхностью.

В остальных случаях адатом Si приближается к поверхности на 2,42 Å и встраивается между четырьмя атомами хлора (из положения 7 на рис. 1б) либо приближается на 1,41 Å и оказывается между тремя атомами хлора (из положения 3 на рис. 1б).

Согласно проведенным расчетам, наиболее энергетически выгодная структура адатома Si на поверхности Si(100)2x1-Cl получается при обмене атома кремния с атомом Cl исходной поверхности. Однако в четырех случаях из семи адсорбция происходит с образованием SiCl₂. Поскольку атомы Cl квазимолекулы слабее связаны с подложкой кремния чем остальные атомы хлора, десорбция квазимолекул SiCl₂ будет происходить при меньшей температуре, чем десорбция хлора (также в виде SiCl₂) с поверхности Si(100)2x1-СІ из монослоя хлора. Таким образом, маска с поверхности кремния после проведения СТМ-литографии может быть удалена при меньших температурах, чем температура десорбции маски. После этого поверхность оказывается очищена от хлора и последующее осаждение адатомов Si будет приводить к росту пленки кремния. Также возможен вариант обмена местами адатома кремния с атомом хлора, при котором маска из хлора все время будет оказываться сверху осаждаемого кремниевого слоя. Оба варианта приводят к росту кремниевого слоя на поверхности Si(100) без нежелательного встраивания атомов хлора в решетку кремния. Предложенный подход потенциально может быть использован при изготовлении устройств, в которых для размещения отдельных примесей применяется СТМ-литография.



Рис. 1. Модели начальных и конечных атомных структур после адсорбции атома Si на поверхность Si(100)2x1-Cl. Атомы кремния поверхности обозначены серыми кружками, атомы хлора — светлосерыми большими кружками, адатом кремния — черным кружком. а) Начальное положение адатома Si над поверхностью, вид сбоку, б) начальные положения адатома Si, вид сверху (атомы второго сверху слоя обозначены серыми кружками большого радиуса, третьего слоя — среднего, четвертого — малого радиуса), в) конечное положение с обменом местами атома Si и Cl, г) конечное положение с образованием квазимолекулы SiCl₂ (одно из нескольких похожих).

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 16-12-00050).

Литература

- 1. Zwanenburg F.A., Dzurak A.S., Morello A., Simmons M.Y., Hollenberg L.C.L., Klimeck G., Rogge S., Coppersmith S.N., Eriksson M.A. Silicon quantum electronics // Rev. Mod. Phys. 2013. V. 85. P. 961.
- 2. Fuechsle M., Miwa J., Mahapatra S., Ryu H., Lee S., Warschkow O., Hollenberg L.C.L., Klimeck G., Simmons M.Y. A single-atom transistor // Nat. Nanotechnol. 2012. V. 7. P. 242.
- 3. Kane B.E. A silicon-based nuclear spin quantum computer // Nature. 1998. V. 393. P. 133-137.
- 4. O'Brien J.L., Schofield S.R., Simmons M.Y., Clark R.G., Dzurak A.S., Curson N.J., Kane B.E., McAlpine N.S., Hawley M.E., Brown G.W. Towards the fabrication of phosphorus qubits for a silicon quantum computer // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 161401R.
- 5. Pavlova T., Shevlyuga V., Andryushechkin B., Zhidomirov G., Eltsov K. Precision arrangement of phosphorus atoms on Si(100) through chlorine mask // Book of abstracts of 3rd International Conference for Young Quantum Information Scientists. 2017. P. 66.
- 6. Kresse G., Hafner J. Ab initio Molecular Dynamics for Liquid Metals // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 558-561.
- 7. *Kresse G., Furthmuller J.* Efficient Iterative Schemes for Ab Initio Total-Energy Calculations Using a Plane-Wave Basis Set // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169–11186.

УДК 537.9

Сверхбыстрое оптическое переключение намагниченности в железоиттриевых гранатах

М.Д. Давыдова¹, К.А. Звездин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Недавно была экспериментально продемонстрирована возможность нетермического переключения намагниченности при помощи фемтосекундного лазерного

излучения в плёнках железо-иттриевого граната (ЖИГ), допированных ионами кобальта [1]. В работе был описан процесс сверхбыстрого полностью оптического переключения намагниченности в прозрачных магнитных плёнках при помощи линейно поляризованного лазерного излучения, и в качестве примера использовался допированный кобальтом ЖИГ. Предложенная модель основана на нелинейном уравнении Ландау–Лифшица–Гильберта для плёнки, однородно намагниченной по кристаллографической оси [001]:

$$\dot{M} = \gamma \left[M, \frac{\partial \Phi}{\partial M} \right] + \frac{\alpha}{M_0} \left[M, \dot{M} \right] + T_E(M, E), \qquad (1)$$

где M – вектор намагниченности ($M_0 = |M|$), $\Phi = \Phi(M)$ – термодинамический потенциал плёнки, в котором учтены анизотропия и магнитостатическая энергия, γ – гиромагнитное соотношение, а α – постоянная затухания Гильберта. Действие электрического поля лазерного излучения E рассматривается в качестве оптического спин-торка $T_E(M, E)$, который записывается из соображений симметрии.

В рамках этой модели был проведён расчёт динамики намагниченности под действием одиночного ультракороткого лазерного импульса. При анализе результатов было получено, что в зависимости от интенсивности лазерного излучения и магнитных параметров плёнки возможны несколько режимов переключения. Кроме того, было найдено, что при изменении поляризации последовательных лазерных импульсов возможно многократное переключение намагниченности, что позволяет записывать и стирать информацию с плёнки. Были проанализированы различные режимы переключения в зависимости от поляризаций последовательных импульсов. Полученные результаты находятся в согласии с экспериментальными данными [1].



Рис. 1. Динамика вектора намагниченности в плёнке допированного кобальтом ЖИГ, происходящая после воздействия на плёнку фемтосекундным лазерным импульсом. Возможные равновесные направления намагниченности обозначены цифрами 1–8. В начальный момент времени намагниченность имела направление 5. Под действием лазерного излучения вектор намагниченности отклоняется, что показано пунктирной линией, после чего происходит свободная динамика (сплошная синяя линия). Конечное состояние намагниченности – 1

Литература

1. A. Stupakiewicz [et al.].. Ultrafast nonthermal photo-magnetic recording in transparent medium // Nature. 2017. V. 542. P. 71–74.

УДК 538.9, 538.935, 537.624

Спиновый диод с двойным антиферромагнитным закреплением

А.А. Худорожков^{1,2}, П.Н. Скирдков^{1,2,3}, К.А. Звездин^{1,2,3}, А.Ф. Попков⁴

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Российский Квантовый Центр

³Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

⁴Национальный Исследовательский Университет «Московский Институт Электронной

Техники»

В представленной работе рассматривается возможность управления частотой и резонансными характеристиками спинового диода с помощью обменного закрепления. Предлагается структура спинового диода на магнитном туннельном переходе, в которой оба ферромагнитных слоя закреплены антиферромагнетиками с разными температурами Нееля. Данная структура исследуется с помощью методов микромагнитного моделирования: исследуется влияние постоянного тока смещения на чувствительность системы, определяется частота резонанса системы, исследуется зависимость резонансной частоты и чувствительности системы от угла между закрепляющими обменными полями. Анализируется зависимость критического постоянного тока (соответствующего переходу в режим автоколебаний) от угла между намагниченностями ферромагнитных слоёв. Результаты сравниваются с аналитической теорией [1]. Также обсуждается зависимость характеристик системы от величины константы затухания Гильберта.

Явление выпрямления радиочастотного сигнала, называемое диодным эффектом, было впервые экспериментально обнаружено в работе [2]. Однако чувствительность структуры в этой работе (около 1,4 В/Вт) была на три порядка ниже, чем у полупроводниковых детекторов на диодах Шоттки (до 3800 В/Вт). Усилия по оптимизации магнитного туннельного перехода позволили продемонстрировать чувствительность спинового диода 14000 В/Вт при приложении наклонного магнитного поля [3] и даже 75400 В/Вт в отсутствие внешнего магнитного поля [4], что намного превышает чувствительность современных приборов на диодах Шоттки [3]. Такая высокая чувствительность в сочетании с возможностью фазового детектирования делает спиновый диод перспективной технологией для микроволновых приложений.

Моделирование было выполнено для различных углов между обменными закрепляющими полями. Для каждого варианта найден критический постоянный ток смещения. Было продемонстрировано, что максимальная чувствительность в такой структуре достигается при плотностях тока смещения, незначительно меньших критического значения (рис. 1). Из-за высоких значений полей обменного закрепления резонансная рабочая частота такого двойного обменно-закрепленного спинового диода может быть значительно выше (до 10 ГГц), чем у традиционного спинового диода со свободным слоем. Кроме того, резонансная частота может быть настроена путем изменения угла между закрепляющими обменными полями (рис. 2).

Также было показано, что угол между средними намагниченностями в ферромагнитных слоях в процессе осцилляций значительно отличается от угла между закрепляющими обменными полями: была исследована зависимость одного угла от другого. Была найдена зависимость критического постоянного тока (при значениях постоянного тока выше критического в системе возникают автоколебания, и она переходит в режим спин-трансферного наноосциллятора) от угла между усреднёнными намагниченностями ферромагнитных слоёв. Данные результаты были сравнены с результатами теоретической работы, исследующей аналогичную структуру [1]. Также было исследовано, как величина критического тока зависит от значения константы затухания Гильберта ферромагнетика.

Наши результаты могут быть использованы для проектирования спинового диода на магнитном туннельном переходе, демонстрирующего максимально возможную чувствительность с резонансной частотой в диапазоне до 10 ГГц при отсутствии



Рис. 1. Зависимость чувствительности от частоты пропускаемого тока для различных токов смещения (угол между намагниченностями равен 120°)



Рис. 2. Зависимость чувствительности диода от частоты пропускаемого тока для различных углов между закрепляющими обменными полями (при токе смещения, равном 99% от критического)

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 16-19-00181.

- 1. *Popkov A.F.* [*et al.*]. Nonlinear spin-torque microwave resonance near the loss of spin state stability // Solid State Communications. 2016. 248. 140–143.
- 2. *Tulapurkar A.A.* [*et al.*]. Spin-torque diode effect in magnetic tunnel junctions // Nature. 2005. 438. 7066. 339–342.
- 3. Miwa S. [et al.]. Highly sensitive nanoscale spin-torque diode // Nature materials. 2014. 13. 50-56.
- 4. Fang B. [et al.]. Giant spin-torque diode sensitivity in the absence of bias magnetic field // Nature communications. 2016. 7. 11259.

УДК 538.951:53.092

Упругие свойства 1-пропанола при высоком давлении

И.В. Данилов^{1,2}, Е.Л. Громницкая¹, А.Г. Ляпин^{1,2}, В.В. Бражкин¹

¹Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН ²Московский физико-технический институт (государственный университет)

1-пропанол является одноатомным спиртом с химической формулой C_3H_7OH . В нем присутствует одна гидроксильная группа OH, способная организовать водородную связь с двумя соседними молекулами. Ранее было исследовано влияние водородных связей на упругие свойства двухатомных и трехатомных спиртов на примерах пропиленгликоля и глицерина [1]. Ультразвуковое исследование 1-пропанола позволит качественно сравнить зависимость упругих свойств спиртов на основе пропанового углеродного скелета от количества водородных связей на молекулу. 1-пропанол обладает высокими барическими производными скоростей ультразвука при комнатной температуре [2], а также аномальной сжимаемостью в жидкой фазе [3]. Так, наблюдается уменьшение объема пропанола при комнатной температуре на 30% при давлении до 1 ГПа (рис. 1).

1-пропанол является глассформером, то есть при быстром охлаждении переходит в стеклообразное состояние, минуя кристаллизацию. Упругие свойства 1-пропанола исследованы в жидком состоянии (комнатная температура 295 К), в стеклообразном состоянии (77 К), а также при отогреве (77–295 К) при переходе стекло-жидкость. Сжимаемость стекла намного меньше, чем жидкости, а скорости ультразвука более чем в два раза выше в стеклообразной фазе (скорость продольной ультразвуковой волны 1,2 км/с при 295 К и 2,6 км/с при 77 К). При расстекловании происходит резкое падение как скоростей ультразвука, так и упругих модулей. Модуль сдвига G пропадает при переходе в невязкое жидкое состояние, а модуль объемной упругости B уменьшается с 4,5 ГПа (77 К, стекло) до 1,5 ГПа (295 К, жидкость). Температура стеклования $T_{\rm g}$ растет с повышением давления отогрева.



Рис. 1. Относительное изменение объема жидкого пропанола при комнатной температуре

Литература

 Lyapin A.G., Gromnitskaya E.L., Danilov I.V., Brazhkin V.V. Elastic properties of the hydrogen-bonded liquid and glassy glycerol under high pressure: comparison with propylene carbonate // RSC Adv. 2017. V. 53. P. 33278.

- 2. *Hagelberg M.P.* Ultrasonic-Velocity Measurements and B/A for 1-Propanol at Pressures to 10 000 kg/cm²// J. Acoust. Soc. Am. 1970. V. 47. P. 158.
- Abdulagatov I.M., Safarov J.T., Aliyev F.Sh., Talibov M.A., Shahverdiyev A.N., Hassel E.P. Experimental densities and derived thermodynamic properties of liquid propan-1-ol at temperatures from 298 to 423 K and at pressures up to 40 MPa // Fluid Phase Equilibria. 2008. V. 268. P. 21.

УДК 537.9

Магнитоэлектрические явления в Fe лангаситах

А.Ю. Тихановский^{1,2}, В.Ю. Иванов¹, А.М. Кузьменко¹, А.М. Балбашов³, А.А. Мухин¹

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

3 Московский энергетический институт

В последние интенсивно изучаются материалы, годы называемые мультиферроиками. Такие объекты интересны тем, что в них присутствует магнитоэлектрическое взаимодействие, которое проявляется в изменении поляризации под действием магнитного поля или изменении намагниченности под действием электрического поля, например как $P_{\mu} = \alpha_{\mu\nu}H_{\nu}$, $M_{\mu} = \beta_{\mu\nu}E_{\nu}$. Одними из соединений, проявляющими магнитоэлектрические свойства, являются кристаллы, принадлежащие к так называемой группе лангаситов La₃Ga₅SiO₁₄. Особо, в последнее время, привлекают внимание железосодержащие лангаситы, такие как Ba₃NbFe₃Si₂O₁₄, Ba₃TaFe₃Si₂O₁₄ и Sr₃TaFe₃Si₂O₁₄; именно они стали объектом исследования в данной работе.

Такие структуры обладают нецентросимметричной кристаллической структурой (группа P321) и образуют винтовую ось ниже $T_N = 27$ K с двойной киральностью магнитных спинов Fe³⁺ [1]. В силу сложного характера магнитоэлектрического взаимодействия такие системы являются слабоизученными, механизм возникновения электрической поляризации в таких соединениях недостаточно проанализирован теоретически.

В работе были исследованы магнитные свойства железосодержащих лагнаситов: Ва₃NbFe₃Si2O₁₄, Ва₃TaFe₃Si₂O₁₄ и Sr₃TaFe₃Si₂O₁₄. Результаты получены с помощью установки MPMS Quantum Design. В ходе измерений выяснилось, что намагниченность соединений в базисной плоскости растет линейно с ростом поля вплоть до величин порядка 5 Тл, а вдоль тригональной оси имеет небольшое отклонение от линейности в области относительно слабых магнитных полей ~2 Тл (рис. 1а). Температурные зависимости показали, что магнитная восприимчивость практически изотропна в парамагнитном состоянии для направлений в базисной плоскости и перпендикулярно ей (рис. 1b). В упрощенной изотропной модели треугольной магнитной сограсуется с экспериментом.

Ранние исследования электрической поляризации железосодержащих лангаситов [2, 3] имели противоречивые сведения, что явилось дополнительной мотивацией к их исследованию. Основным результатом работы является обнаружение индуцированной магнитным полем поляризации, а также выявление основных закономерностей в её поведении, связанных с ориентацией поля. Для всех образцов результаты оказались схожими.

1. В поле вдоль оси с поляризация мала и, видимо, обусловлена неточной ориентацией образца.

2. Обнаружено, что для конфигураций $P_a(H_b)$ и $P_b(H_a)$ поляризация быстро возрастает, начиная с некоторого критического поля, причем знак её зависит от направления проекции поля на ось *с*.

3. Для выяснения влияния контролируемой проекции поля на ось *c* детально исследованы конфигурации: $P_a(H_{b\pm 45c})$, $P_b(H_{a\pm 45c})$ и $P_a(H_{a45b\pm 45c})$, которые показали плавное изменение поляризации с полем и подтвердили изменение знака при отклонении на $\pm 45^{\circ}$ (рис. 2a, b).

Измерения температурных зависимостей индуцированной полем поляризации выявили смену знака при переходе в парамагнитную область при $T \approx 27$ К. При этом появление электрической поляризации связано с наличием проекции на ось *с* (рис. 3).



Рис. 1. а) Кривые намагниченности BNFSO при температуре *T* ≈ 2 К для ориентаций магнитного поля вдоль различных кристаллографический осей b) температурная зависимость магнитной восприимчивости BNFSO в поле *H* = 1 кЭ для ориентаций H||с и H||b



Рис. 2. $P_a(H)$ зависимость для BNFSO в полях, лежащих в плоскости, сформированной осью с и биссектрисой (*ab*) – плоскости, при температурах $T \approx 9$ K (a) и $T \approx 30$ K (b)



Рис. 3. Температурная зависимость *P_a* в поле *H* = 6 Т, направленном под различными углами в плоскости, сформированной осью *с* и биссектрисой (*ab*) – плоскости

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РНФ № 16-12-10531.

Литература

- 1. *Marty K.* [*et al.*]. Magnetic and dielectric properties in the langasite-type compounds: A₃BFe₃D₂O₁₄ (A=Ba, Sr, Ca; B=Ta, Nb, Sb; D=Ge, Si) // Phys. Rev. Lett. 2008. 101. 247201.
- Narita H. [et al.]. Observation of nonreciprocal directional dichroism via electromagnon resonance in a chiral-lattice helimagnet Ba₃NbFe₃Si₂O₁₄// Phys. Rev. B. 2016. 94. 094433.
- Lee N., Choi J., Cheong S.-W. Magnetic control of ferroelectric polarization in a self-formed single magnetoelectric domain of multiferroic Ba₃NbFe₃Si₂O₁₄ // Appl. Phys. Lett. 2014. 104. 072904.

УДК 539.21

Электронная структура и свойства кластеров Si_nH_{2m} с различной степенью пассивации

Н.А. Фокина^{1,2}, В.С. Батурин^{1,2}, С.В. Лепешкин^{1,2}, Ю.А. Успенский²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Особые свойства наночастиц вызывают большой интерес на протяжении последних десятилетий [1]. В данной работе исследовались электронные свойства нанокластеров Si_nH_{2m} с n = 7-14. Эти кластеры являются удобным объектом для компьютерного моделирования свойств наночастиц кремния, покрытых слоем лиганда. В зависимости от количества молекул лиганда, покрывающих поверхность наночастицы, ее структура сильно перестраивается. В этой работе была предпринята попытка проследить изменения атомной и электронной структуры в зависимости от соотношения атомов кремния и лиганда (водорода).

Для нахождения атомных структур нанокластеров кремния нами был использован эволюционный алгоритм глобального поиска минимума энергии (код USPEX [2]). Энергия системы рассчитывалась из первых принципов в рамках теории функционала плотности (DFT) с помощью пакетов программ VASP и FHI-aims. Релаксация атомов к положениям локального равновесия производилась с точностью до сил < 0.001 эВ/А. Полное вычисление атомной структуры одного кластера требовало просмотра около 3000 конфигураций.

Расчеты показали, что кластеры с $m \ge n + 6$ имеют кристаллическую структуру, то есть соответствуют фрагменту кристалла с оборванными связями, пассивированными водородом. Кластеры, Si_nH_{2m} с $m \ge n + 8$ имеют множество близких по энергии изомеров. На рис. 1 рассмотрены их энергии, отложенные от энергии основного состояния E_0 . Изомеры образуют квазинепрерывный спектр, многие из них удовлетворяют соотношению $E_{\rm isomer} - E_0 < k_B T$, T = 300 К. Следовательно, при комнатной температуре вместо кластеров одного типа будет существовать ансамбль кластеров разной формы.

Нами была рассмотрена электронная структура рассчитанных кластеров, в частности ширина их полупроводниковой щели. Хорошо известно, что ширина щели, вычисленная в рамках теории функционала плотности, существенно меньше ширины щели, полученной из эксперимента. В связи с этим нами был разработан более точный метод, основанный на аналитической формуле [3]. Чтобы сделать расчет удобным для практического использования, нами был введен ряд приближений. Волновые функции электрона аппроксимировалась равномерным распределением внутри сферы радиуса $R_{\rm eff}$, а взаимодействие электронов учитывалось в упрощенной форме $W(r,r') = \frac{e^2}{\varepsilon v r - r r v}$, где $\varepsilon = 1,3$ — эффективная диэлектрическая проницаемость кластера. На основе этих приближений была получена простая формула для ширины щели:

$$E_g^{corr} = E_g^{DFT} + \frac{1.2e^2}{R_{eff}\varepsilon}.$$
 (1)

На рис. 2 представлено сравнение этого метода с точным методом расчета. Хорошо видно, что результаты, полученные приближенным методом, очень близки к точным и отличаются от них не более чем на 0,3 эВ.

Используя данную формулу, мы рассмотрели зависимость ширины щели E_g от диаметра кластера (рис. 3). При увеличении размера кластера наблюдается уменьшение его ширины щели, что согласуется с экспериментом. Наблюдаемый разброс величин E_g связан с различным составом. Это отражено на графике (рис. 3), где различные соотношения атомов кремния и водорода выделены разными маркерами: каждому $\Delta = m - n$ соответствует свой маркер. Точки, соответствующие разным Δ хорошо ложатся на прямые; линии, соответствующие большему Δ лежат выше. Для $\Delta = 8$ разброс точек выше из-за большого количества близких по энергии изомеров. На рис. 4 такие кластеры рассмотрены подробнее: для каждого состава показаны ширины щели, соответствующие нескольким низкоэнергетическим изомерам. Изомеры, которые будут существовать при комнатной температуре ($E_{isomer} - E_0 < k_BT$, T=300 K), выделены белыми круглыми маркерами. На рисунке видно, что близкие по энергии кластеры могут заметно отличаться по ширине щели: их разброс до 1 эВ.

В заключение, перечислим основные результаты, полученные в настоящей работе. Нами была рассчитана атомная и электронная структура кластеров Si_nH_{2m} с n = 7-14 и проанализирована ширина их полупроводниковой цели. Для этого был разработан простой и достаточно точный метод вычисления поправки к ширине цели, полученной из расчетов DFT. Выполнено исследование зависимости ширины щели от диаметра кластеров в области малых размеров, пока недоступной для эксперимента. Выявлена сложная зависимость ширины полупроводниковой щели от степени пассивации кластера и объяснена причина размытия щели в кластерах с большой степенью пассивации.



Рис. 1. Энергии изомеров Si_nH_{2m} с $m \ge n + 8$. Энергия отсчитывается от основного состояния. Пунктирная линия соответствует уровню $E_{isomer} - E_0 = k_B T$



Рис. 2. Сравнение результатов точного расчета ширины щели и предложенного нами метода (см (1)). Здесь также приведены значения ширины щели, получающиеся непосредственно из расчетов DFT



Рис. 3. Зависимость ширины щели кластеров Si_nH_{2m} от их диаметра. Маркерами выделены кластеры с разным значением величины m-n



Si7H16 Si8H16 Si9H18 Si10H18 Si11H20 Si12H20 Si13H22 Si14H22

Рис. 4. Ширина полупроводниковой щели для изомеров Si_nH_{2m} с $m \ge n+8$

Литература

- 1. NANOSILICON / ed. by V. Kumar. Amsterdam: Elsevier, 2007. 388 p.
- 2. Oganov A.R, Glass C.W. Crystal structure prediction using ab initio evolutionary algorithms: principles and applications // J. Chem. Phys. 2006. 124. 244704.
- 3. Тихонов Е.В., Успенский Ю.А, Хохлов Д.Р. // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 98, № 1. С. 17–22.

УДК 535.015

Изучение факторов, снижающих эффективность иттербиевых волоконных лазеров и усилителей, излучающих в спектральной области около 0.98 мкм

Т.Л. Бардина^{1,2}, С.С. Алешкина², Д.С.Липатов³, М.М. Бубнов², А.Н. Гурьянов³, М.Е. Лихачев²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Научный центр волоконной оптики РАН ³Институт химии высокочистых веществ РАН

Иттербиевые волоконные лазерные источники представляют собой одно из наиболее перспективных и развивающихся направлений волоконной оптики. При этом большинство исследований посвящено достижению высоких средних и пиковых мощностей в источниках, излучающих на длине волны более 1 мкм. Работ, посвященных иттербиевым волоконным лазерам и усилителям, излучающим в диапазоне длин волн около 0,98 мкм, сравнительно меньше, что главным образом связано с высокими порогами генерации (генерация осуществляется по трехуровневой схеме) и необходимостью подавления спонтанной люминесценции с максимумом на 1,03 мкм (осуществляется по четырехуровневой схеме). В то же время расчет скоростных уравнений предсказывает, что эффективность преобразования излучения накачки на 915 нм в излучение сигнала на 976 нм таких систем может достигать 80%. Но на практике эффективность схем на основе иттербиевых световодов с двойной отражающей оболочкой не превышает 50% [1, 2].

Обычно используемые для расчетов лазерных систем скоростные уравнения записываются исходя из предположения, что световоды в схеме являются одномодовыми как на длине волны сигнала, так и на длине волны люминесценции [3]. Это утверждение становится неверным для волоконных конструкций с увеличенным размером сердцевины, в которых одномодовый режим распространения достигается путем селективного возбуждения фундаментальной моды. Кроме того, следует принять во внимание, что при увеличении размера сердцевины относительно размера первой отражающей оболочки кванты люминесценции, захваченные ее апертурой, также могут снимать инверсную населенность и оказывать влияние на эффективность всей лазерной системы. В настоящей работе проведено исследованиея влияния неодномодовости излучения на длинах волн люминесценции на эффективность иттербиевых волоконных лазеров, излучающих в спектральной области около 0,98 мкм. Расчет скоростных уравнений производился в приближении двухуровневой энергетической схемы. Чтобы учесть возможность излучения кванта энергии на длине волны люминесценции в совокупности мод, к члену, отвечающему мощности спонтанно испущенного кванта, был добавлен множитель, равный произведению количества мод сердцевины (1) на интеграл перекрытия мод сердцевины и легированной области, который для простоты был принят равным единице.

$$N_{\rm сердц} = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi D_{\rm сердц} N A_{\rm сердц}}{\lambda_{\rm люм}} \right)^2, \tag{1}$$

где $D_{\text{серди}}$ – диаметр сердцевины, $NA_{\text{серди}}$ – апертура сердцевины, $\lambda_{\text{люм}}$ – длина волны люминесценции.

В случае спонтанной люминесценции, удерживаемой первой отражающей оболочкой, излучающей областью является только область сердцевины. Поэтому усиление спонтанной люминесценции, распространяющейся по оболочке, будет пропорционально произведению

$$I_{p} * \frac{1}{2} \left(\frac{\pi D_{o\delta} NA_{o\delta}}{\lambda_{MOM}}\right)^{2}, \qquad (2)$$

где I_p – интеграл перекрытия мод оболочки с областью легирования (равный в нашем случае отношению площадей сердцевины и оболочки), N_{o6} – количество мод оболочки, D_{o6} – диаметр оболочки, NA_{o6} – апертура оболочки, $\lambda_{люм}$ – длина волны люминесценции. Чтобы оценить влияние мод оболочки на выходные характеристики усилителя, в систему скоростных уравнений были добавлены соответствующие скоростные уравнения.

Расчеты показали, что наибольшее влияние на эффективность усиления оказывает неодномодовость сердцевины. Максимальная эффективность достигается при соотношении диаметров сердцевины к оболочке большей 0,7–1 (рис. 1а). Люминесценция, распространяющаяся по оболочке, оказывает влияние при размерах сердцевины близких к размеру оболочки.

Эксперимент по усилению лазерного излучения на длине волны 976 нм в многомодовых волоконных световодах был поставлен с целью проверки основных выводов, полученных в рамках теоретической части данной статьи. Для этого были реализованы два многомодовых световода с соотношением средних диаметров сердцевины и оболочки, равным 0,43 (60/140 мкм) и 0,76 (95/125 мкм).

Схема усилителя для измерения эффективности сигнала состояла из задающего лазера [4] и усилительной части, включающей объединитель мощности сигнала и накачки, и один из исследуемых многомодовых световодов. Эксперимент показал, что для световода 60/140 мкм люминесценция, распространяющаяся по сердцевине, наиболее сильно оказывает влияние на эффективность. Проведенный расчет согласуется с экспериментом, что подтверждает доминантное влияние неодномодовости сердцевины (рис. 16). Многомодовый усилитель сигнала на длине волны 0,976 мкм на световоде 95/125 мкм показал рекордную эффективность для схем с многомодовой накачкой 66%. Экспериментальная эффективность оказалась ниже рассчитанной (рис. 1в). Это несоответствие могло возникнуть предположительно из-за недостаточного перемешивания мод в скругленной оболочке.



Рис. 1. а – Рассчитанная зависимость эффективности усиления сигнала на 976 нм в иттербиевых волоконных световодах от соотношения диаметра сердцевины к оболочке; б и в – рассчитанная и экспериментальная зависимость эффективности усиления на 976 нм от длины световода для световодов с отношением средних диаметров сердцевины и оболочки 0,43 (б), 0,76 (в); на вставках фото торцов исследуемых световодов

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант РНФ 16-12-10553).

Литература

- Johan Boullet [et al.]. High power ytterbium-doped rod-type three-level photonic crystal fiber laser // Opt. Express. 2008. V. 16. P. 17891–17902.
- 2. *Martin Leich* [*et al.*]. Investigation of a large core 976nm Yb fiber laser for high brightness fiber-based pump surces // Fiber Lasers XI:Technology, Systems, and Applications. 2014. SPIE 8961. 89610Z.
- 3. *Becker P.M.* [*et al.*]. Erbium-doped fiber amplifiers: fundamentals and technology // Academic press, 1999. 460 p.
- 4. Svetlana S. Aleshkina [et al.]. 5.5 W monolithic single-mode fiber laser and amplifier operating near 976 nm // Fiber lasers XIII: Technology, Systems, and Applications. 2016. SPIE 9728. 97281C.

УДК 537.9

Обменное взаимодействие и параметры электронной структуры в ферромагнитном полуметалле EuB₆

В.С. Журкин¹, М.А. Анисимов², А.В. Богач², А.Д. Божко², А.В. Духненко³, Н.Ю. Шицевалова³, Н.Е. Случанко², В.В. Глушков^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН ³Институт проблем моториовородония им. И. Францорино НАН Украина

³Институт проблем материаловедения им. И. Францевича НАН Украины

Гексабориды RB₆ обладают поразительным разнообразием видов основного состояния – от сверхпроводников LaB₆ и YB₆ до тяжелофермионного металла CeB₆ и узкозонного полупроводника с промежуточной валентностью SmB₆ [1]. В ряду гексаборидов редкоземельных элементов EuB₆ является единственным ферромагнитным полуметаллом. При понижении температуры в гексабориде европия наблюдаются два последовательных фазовых перехода: магнитный – при $T_c \approx 14$ K – и переход полуметалл-металл – при $T_M \approx 16$ K [1].

Наличие двух фазовых переходов и связанных с ними аномалиях транспортных и термодинамических свойств вызывают вопросы об характере и типе магнитного взаимодействия, которое определяет необычные свойства EuB_6 [2]. Действительно, в окрестности T_M наблюдается эффект колоссального магнитосопротивления, амплитуда которого достигает 90% в поле ~8 Тл. Отрицательное магнитосопротивление принято связывать с формированием магнитных поляронов в условиях сильного обменного взаимодействия между локальными магнитными моментами Eu^{2+} и 5*d*-электронами зоны проводимости. Сильное обменное взаимодействие приводит к спиновому расщеплению

зоны проводимости в ферромагнитной фазе EuB_6 . Однако, согласно данным работы [3], степень спиновой поляризации в EuB_6 не превышает 56%. Напротив, согласно данным RIXS и расчетам зонной структуры в EuB_6 следует ожидать состояние с полностью поляризованными носителями заряда (half-metallic state) [4].

Для оценки степени поляризации зонной структуры и параметров носителей зараяда гексаборида европия в работе были измерены транспортные и магнитные характеристики (удельное сопротивление, эффект Холла и коэффициент термоэдс) монокристаллов EuB_6 в диапазоне температур 1,8–300 К, в полях до 8 Тл. Монокристаллические образцы EuB_6 , исследуемые в данной работе, были выращены в институте проблем материаловедения им. И. Францевича НАН Украины методом зонной плавки в атмосфере инертного газа. Сопоставление данных удельного сопротивления для образцов, выращенных с различным числом проходов зоны, показало, что наименьшее остаточное сопротивление получается в результате одного прохода зоны. Из амплитуды диффузионного вклада термоэдс в рамках модели одной группы носителей заряда и с учетом трехкратного вырождения зоны проводимости в точках X зоны Бриллюэна и холловской концентрации электронов $n_H = 3,57 \cdot 10^{19}$ см⁻³ были оценены $m_{eff} = 0,23m_0$, фермиевский волновой вектор $k_f = 1,02 \cdot 10^7$ см⁻¹ и энергия Ферми $\varepsilon_f = 171$ мэВ.

При измерении магнитосопротивления образца ЕиB₆, выращенного с одним проходом зоны, наблюдались квантовые осцилляции Шубникова-де Гааза (рис. 1а). Из периода осцилляций были выполнены оценки площади экстремального сечения поверхности Ферми $S = 27,77 \cdot 10^{12}$ см⁻², а также параметра $k_{\rm f} = 2,97 \cdot 10^6$ см⁻¹ и концентрации носителей заряда $n_0 = \frac{k_{\rm f}^3}{2\pi^2} = 1,33^{\cdot}10^{18}$ см⁻³. Из температурной зависимости амплитуды осцилляций магнитосопротивления A(T), где $A(T) = \left(\frac{\Delta \rho}{\rho}\right)$ (рис. 2b), была оценена эффективная масса $m_{\rm eff}$ ~0,2 m_0 которая неплохо согласуется со значением, полученным из температурной зависимости коэффициента термоэдс. Из полевой зависимости $A(B^{-1})$ оценка времени релаксации дает значение $\tau = 1,66 \cdot 10^{-13} c$ (рис. 2a). Поскольку $n_0 \ll n_H$, можно предположить, что параметр n_0 отвечает состояниям подзоны проводимости со спином, противоположным направлению магнитного поля $(n_0 \equiv n_{\downarrow})$. В этом случае, используя прямой расчет, получаем оценку концентрации электронов проводимости со спином, поляризованным по полю: $n_{\uparrow} = n_H - n_{\downarrow} = 3,43 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Соответствующее значение поляризации $p = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n_{\uparrow} + n_{\downarrow}} = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n_H} = 92,4\%$ показывает, что в ферромагнитной фазе EuB_6 не реализуется полностью спин-поляризованное состояние (half-metallic state). При этом оценка энергии обменного взаимодействия $\mathcal{J} = \frac{\varepsilon_{f\uparrow} - \varepsilon_{f\downarrow}}{2} \cong 120 \text{ мэВ}$ (см. вставку на рис. 1) дает значение, которое хорошо согласуется с литературными данными [5–6].



Рис. 1. Квантовые осцилляции удельного сопротивления *EuB*₆ в сильных полях. На вставке приведена схема расщепления зоны проводимости гексаборида европия в ферромагнитном состоянии



Рис. 2. а) Зависимость амплитуды осцилляций магнитосопротивления от магнитного поля в точках экстремума б) зависимость амплитуды осцилляций магнитосопротивления от температуры в точках экстремума для *EuB*₆. Прямые линии соответствуют результатам линейной аппроксимации методом наименьших квадратов

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 15-02-03166).

- Etourneau J., Hagenmuller P., Structure and physical features of the rare-earth borides, // Philosophical Magazine. Part B. 1985. V. 52, N 3. P. 589–610.
- 2. Süllow S. [et al.]. Structure and magnetic order of EuB₆ // Physical Review. B. 1998. V. 57, N 10.

P. 5860–5869.

- 3. *Yu U., Min B. I.* Magnetic-phase transition in the magnetic-polaron system studied with the Monte Carlo method: Anomalous specific heat of EuB6, // Physical Review. B. 2006. V. 74, N 9. P. 094413.
- 4. Zhang X. [et al.]. Spin-Dependent Electronic States of the Ferromagnetic Semimetal EuB₆, // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 100, N 16. P. 167001.
- 5. Jungho K. [et al.]. Spin-split conduction band in EuB₆ and tuning of half-metallicity with external stimuli, // Physical Review. B. 2013. V. 87, N 15. P. 155104.
- 6. *Glushkov V.V.* [*et al.*]. Tuning of exchange by band filling in low-carrier-density magnet Eu(Gd)B₆, // Phys. Stat. Sol. (b). 2016. V. 254, N 4. P. 1600571.

УДК 538.911

Переходы между бистабильными состояниями экситон-поляритонов в полупроводниковом микростолбике

А.В. Уваров^{1,2}, С.С. Гаврилов³, Н.А. Гиппиус¹

¹Сколковский институт науки и технологий ²Московский физико-технический институт (государственный университет) ³Институт физики твёрдого тела РАН

Полупроводниковый микрорезонатор представляет собой микроскопический резонатор Фабри–Перо, в полости которого находится слой полупроводника. Если резонатор выращен так, что фотонная мода близка к энергии экситонного состояния в полупроводниковом слое, то фотонная и экситонная моды смешиваются, и в результате возбуждения системы описываются составными квазичастицами – экситон-поляритонами. В последние годы экситон-поляритоны привлекли интерес исследователей сильными нелинейно-оптическими эффектами. Возможность получения когерентного излучения в таких системах при гелиевых температурах [1, 2] напоминает эффект бозе-конденсации, а в органических микрорезонаторах эти эффекты наблюдаются вплоть до комнатной температуры [3].

При циркулярно поляризованной когерентной монохроматической накачке и большом числе поляритонов волновая функция конденсата ψ приближённо описывается уравнением Гросса–Питаевского [4], которое в представлении волновых векторов имеющий следующий вид:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{k},t) = [\omega(\mathbf{k}) - i\gamma(\mathbf{k})]\psi(\mathbf{k},t) + \delta(\mathbf{k},\mathbf{k}_p)fe^{-i\omega_p t} + V\sum_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2}\psi^*(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 - \mathbf{k},t)\psi(\mathbf{q}_1,t)\psi(\mathbf{q}_2,t).$$

Здесь $\omega(\mathbf{k})$ – закон дисперсии нижней ветви поляритонов, $\gamma(\mathbf{k})$ – их затухание, f – амплитуда накачки на частоте ω_p . Выбор коэффициента V = 1 (по определению) фиксирует выбор относительных единиц для ψ и f. Суммирование \mathbf{q}_1 , \mathbf{q}_2 производится по всему **k**-пространству. В одномодовом приближении (при котором ψ отлична от нуля только при волновом векторе \mathbf{k}_p) существует бистабильный режим, с тремя положениями равновесия, два из которых устойчивы (рис. 1). Этот режим достигается при помощи отстройки $D=\omega_p-\omega$ на величину больше, чем $\gamma\sqrt{3}$ [5].

Если в бистабильном режиме огибающая накачки f имеет вид:

$$f(t) = f_0 + f_1 2^{-\frac{(t-t_0)^2}{2\tau^2}} e^{i\varphi},$$

где τ невелико по сравнению с D^{-1} , а φ – произвольная фаза, то после переходного процесса система может «переключиться» из одного положения равновесия в другое. Другие поляритонные моды могут повлиять на процесс, так как нелинейный член в уравнении Гросса–Питаевского связывает их друг с другом. Например известно, что благодаря параметрическому рассеянию нижнее положение равновесия может потерять устойчивость [4] при меньших величинах накачки, чем это следует из одномодовой модели.

Чтобы уменьшить влияние других мод, из микрорезонатора вытравливается

столбик диаметром в несколько мкм. В таком столбике спектр превращается из непрерывного в набор дискретных уровней, соответствующих собственным состояниям в двумерной круглой потенциальной яме. Мы предполагаем, что при достаточно малом размере столбика (т.е. достаточно большом разделении уровней по энергии) нижний энергетический уровень можно описывать одномодовым приближением. Цель данной работы состоит в проверке этой гипотезы.

Мы рассчитали отклик микростолбика радиусом 1 мкм на вышеописанный способ накачки. Для заданной «фоновой» накачки мы меняли интенсивность короткого импульса и его разность фаз с «фоновой» накачкой. Энергия невозмущённого экситонного состояния равна 1500 мэВ. При $\hbar D = 0.6$ мэВ, $\hbar \gamma = 0.014$ мэВ, $\tau = 0.2$ пс одномодовая модель и расчёт двумерного поляритонного газа в микростолбике показывают близкие результаты (рис. 2). При увеличении радиуса столбика до 10 мкм и выше другие уровни энергии оказываются в околорезонансном положении, и тогда система более не описывается моделью одномодового нелинейного осциллятора.

Мы также сравнили значения накачки, при которых происходит переход в верхнее положение равновесия, с порогом параметрического рассеяния и с границей существования нижней ветви и обнаружили, что процесс параметрического рассеяния подавлен по сравнению с микрорезонатором неограниченного размера.



Рис. 1. Стационарные состояния для уравнения Гросса–Питаевского в одномодовом приближении. Здесь $\mathbf{k} = 0$, $\hbar(\omega_p \cdot \omega(\mathbf{k})) = 0.6$ мэВ, $\hbar\gamma = 0.014$ мэВ. Пунктиром обозначены переключаемые состояния



Рис. 2. Зависимость конечного состояния системы от амплитуды и фазы короткого импульса накачки для одномодовой системы (слева) и полупроводникового столбика радиусом 1 мкм (справа). hD = 0.6 мэB, hγ = 0.014 мэB, τ = 0.2 пс. Светлые пиксели обозначают верхнее положение равновесия, тёмные – нижнее

Литература

- 1. Deng H., Haug H., Yamamoto Y. Exciton-polariton Bose-Einstein condensation // Rev. Mod. Phys. 2010. V. 82. P. 1489–1537.
- Keeling J., Berloff N.G. Exciton-polariton condensation // Contemporary Physics. 2011. V. 52. P. 131– 151.
- 3. *Lerario G.* [*et al.*]. Room-temperature superfluidity in a polariton condensate // Nature Physics. 2017. V. 13. P. 837–841.
- 4. *Gavrilov S.S.* [*et al.*]. Blowup dynamics of coherently driven polariton condensates: Experiment // Phys. Rev. B. 2015. V. 92. P. 205312.
- 5. Гаврилов С.С. [и др.]. Мультистабильность оптического отклика системы квазидвумерных экситонных поляритонов // ЖЭТФ. 2010. Т. 137. С. 943–955.

УДК: 537.635

Электронный спиновый резонанс в твердых растворах замещения (Fe_{1-x}Mn_x)_{0,95}Co_{0,05}Si с сильными электронными корреляциями

Д.И. Ибрагимов^{1,2}, А.В. Семено¹, М.И. Гильманов^{1,2}, С.В. Демишев¹

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

В связи с ростом в последнее время научного интереса к свойствам геликоидальноупорядоченных магнитных фаз, большое внимание в физике магнетизма вызывает группа зонных магнетиков с отсутствием центра симметрии, таких как MnSi, Mn_{1-x} Fe_xSi, Fe_{1-x}Co_xSi. Среди этих соединений особые перспективы исследований возлагают на состав Fe_{1-x}Co_xSi в связи с возможностью радикального изменения параметров взаимодействия и соответствующих свойств системы путем незначительного изменения стехиометрии. При этом крайние составы FeSi и CoSi – парамагнетик и диамагнетик соответственно, а ферромагнитная фаза с геликоидальным упорядочением наблюдается в широком концентрационном диапазоне 0,05 < x < 0,8 [1]. Так как метод электронного спинового резонанса (ЭСР) может служить мощным инструментом при изучении свойств сильнокоррелированных систем, настоящая работа нацелена на применение метода ЭСР к системе Fe_{1-x}Co_xSi (с примесью 5% Mn) для изучения магнитных свойств этого соединения.

В данной работе представлены результаты исследований высокочастотного (60 ГГц) электронного спинового резонанса монокристаллических образцов твердых растворов замещения (Fe_{1-x}Mn_x)_{0,95}Co_{0,05}Si при $x = \{0,2; 0,3; 0,5\}$ в диапазоне температур: 1,9–160 К. Эти результаты были проанализированы совместно с данными по статической намагниченности, полученными в диапазоне температур 1,8–300 К в полях до 7 Тл.

Обнаружено, что ЭСР-спектр образцов состоит из единственной резонансной линии с формой, характерной для ЭСР на локализованных магнитных моментах (ЛММ) в металлах. Анализ резонансной линии в модели ЛММ позволил получить температурные зависимости *g*-фактора, ширины линии ΔW и осциллирующей намагниченности M_0 . Показано, что зависимость $M_0(T)$ хорошо масштабируется с температурной зависимостью статической намагниченности $M_{stat}(T)$, полученной при обработке данных с СКВИД-магнетометра (рис. 1а). Данный факт свидетельствует, что все магнитные моменты участвуют в осцилляциях ЭСР. Для всех составов обнаружена линейная зависимость ширины линии выше $T_c: \Delta W(T) \sim a + bT$ (рис. 1b), что показывает доминирующую роль в этих соединениях механизма Корринги для релаксации магнитных моментов.



Рис. 2. а) Температурная зависимость осциллирующей намагниченности M_0 , нормированная на температурную зависимость статической намагниченности M_{stat} в резонансном поле для образца (Fe_{0,7}Co_{0,3})_{0,95}Mn_{0,05}Si, b) зависимость ширины линии ЭСР от температуры исследованных образцов

Работа поддержана программами Президиума РАН «Электронный спиновый резонанс, спин-зависимые электронные эффекты и спиновые технологии» и «Электронные корреляции в системах с сильным взаимодействием».

Литература

1. *A. Bauer* [*et al.*]. History dependence of the magnetic properties of single-crystal Fe_{1-x}Co_xSi // Phys. Rev. B. 2016. 93. 235144.

Секция физики высоких плотностей энергии

УДК 533.723

Экспериментальное изучение коэффициента диффузии в лазерноиндуцированном потоке плазменно-пылевого монослоя

А.А. Алексеевская^{1,2}, К.Г. Косс^{1,2}, К.Б. Стаценко^{1,2}, М.М. Васильев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Объединенный институт высоких температур РАН.

Изучение диффузии имеет огромное значение с фундаментальной точки зрения (например, для исследования динамики и фазовых состояний открытых систем, проверки существующих статистических закономерностей и выявления новых), а также может быть полезно для управления системами сильно взаимодействующих объектов [1, 2]. Полученные знания могут найти применение в астрофизике, медицинских технологиях, наноинженерии и других областях науки. Проблема, решению которой посвящена данная работа, является актуальной в области физики плазмы. Особенный интерес представляет исследование транспортных процессов в пылевой плазме: диффузии, вязкости, теплопроводности. Эти явления позволяют получить новую информацию о структуре и свойствах сильно неидеальной пылевой подсистемы. Настоящая работа посвящена экспериментальному изучению коэффициента диффузии в лазерно-индуцированном потоке плазменно-пылевого монослоя.

Эксперименты проводились в газоразрядной вакуумной камере, в которую были помещены два электрода. В разряд вбрасывались пластиковые частицы (d = 10,6 мкм), которые, попадая в разряд, приобретали отрицательный заряд и зависали в приэлектродном слое ВЧ ёмкостного разряда за счет баланса гравитационной и электрической силы. Для удержания пылевого облака и предотвращения ухода частиц в горизонтальном направлении на нижнем электроде устанавливалось кольцо диаметром 6,5 см, формирующее потенциальную ловушку. Частицы подсвечивались твердотельным лазером. Течение создавалось более мощным аргоновым лазером. Результаты регистрировались видеокамерой, которая располагалась вертикально. 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, корреляционные функции. С помощью зависимостей среднеквадратичного смещения от времени была оценена скорость макроскопического смещения частиц для направления Х (вдоль потока) и Ү (перпендикулярно потоку). После вычитания макроскопической составляющей смещения был оценен коэффициент диффузии в двух этих направлениях и выявлено немонотонное поведение продольной составляющей коэффициента диффузии.

- 1. Kim D. Giant Acceleration of DNA Diffusion in an Array of Entropic Barriers // PRL. 2017.
- 2. Liu Bin, Goree J., Nosenko V. // Physics of Plasmas. 2003.

УДК 533.924

Фазовый переход в двумерной плазменно-пылевой структуре частиц меламин-формальдегида при кинетическом нагреве лазерным излучением

Е.А. Кононов¹, М.М. Васильев^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}

¹Объединенный институт высоких температур РАН ²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Представлены результаты экспериментального исследования фазового перехода в двумерной плазменно-пылевой структуре из частиц меламин-формальдегида с модифицированной поверхностью, при кинетическом разогреве лазерным излучением.

Эксперименты проводились в плазме емкостного высокочастотного (ВЧ) разряда. По экспериментальным видеоданным об эволюции пылевой подсистемы при кинетическом нагреве лазерным излучением плазменного кристалла после ~ 90 минут экспозиции в ВЧ-разряде были получены координаты пылевых макрочастиц для каждого момента времени, на основе которых восстановлены парные корреляционные функции и средние кинетические энергии движения частиц, проведены оценки эффективного параметра неидеальности $\Gamma^*[1]$.

Экспериментально обнаружено, что в начальный момент времени при воздействии лазерного излучения на плазменно-пылевую структуру, сформированную из макрочастиц меламин-формальдегида, кинетического разогрева не наблюдалось. В то же время, после экспозиции макрочастиц в газовом разряде более 90 минут, воздействие лазерного излучения приводило к увеличению их кинетической энергии, и в пылевом монослое наблюдался фазовый переход.

Представлены результаты исследования методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) исходных частиц меламин-формальдегида и частиц, извлеченных из плазменно-пылевой структуры после экспозиции, и их поверхности. Обнаружено, что при экспозиции частиц меламин-формальдегида в газовом разряде на поверхность макрочастиц осаждались продукты эрозии электродов, в результате чего образовалась металлическая островковая пленка. Вследствие такой модификации частицы в плазменно-пылевой структуре могут эффективно поглощать лазерное излучение, в результате чего возникающая фотофоретическая сила может вносить вклад в движение частиц. Таким образом, наблюдаемый фазовый переход в двумерной плазменно-пылевой структуре частиц меламин-формальдегида можно объяснить модификацией их поверхности.

Литература

1. Vaulina O.S., Dranzhevski I.E. Transport of macroparticles in dissipative two-dimensional Yukawa systems // Physica Scripta. 2006. V. 73. P. 577 – 586.

УДК 533.9.03

Диффузия в ограниченном ансамбле заряженных частиц в постоянном магнитном поле

Э.А. Саметов², О. С. Ваулина^{1,2}, Е.А. Лисин¹

¹Объединенный институт высоких температур РАН ²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Представлены результаты численных исследований динамики заряженных частиц в ограниченном облаке, находящемся в постоянном магнитном поле. Расчеты выполнялись для ионов с различными массами и зарядами в широком диапазоне параметров исследуемых систем. Численные исследования показали, что поперечный коэффициент диффузии для ограниченного ансамбля частиц соответствует формуле Таунсенда.

Впервые рассмотрено влияние тепловой диффузии частиц на их движение в пространственно однородном магнитом поле. Предложены аналитические оценки для анализа величины данного эффекта.

Результаты настоящей работы могут быть полезны при выборе оптимальных рабочих параметров энергетических установок для эффективного разделения Отработанного Ядерного Топлива (ОЯТ) [1–4], а также для качественного анализа поведения слабонеидеальной пылевой плазмы в пристеночной области установок для управляемого термоядерного синтеза (УТС) [5–7].

Литература

- 1. *Тимофеев А.В.* // Физика плазмы. 2007. 33. 971.
- 2. Жильцов В.А., Кулыгин В.М., Семашко Н.Н. [и др.]. // Атомная энергия. 2006. 101. 302.
- 3. Cluggish B.P., Anderegg F.A., Freeman R.L., Gilleland J., Hilsabeck T.J., Isler R.C., Lee W.D., Litvak A.A., Miller R.L., Ohkawa T., Putvinski S., Umstadter S., and Winslow S. // Plasma Phys. 2005. 12.057101.
- 4. Ворона Н.А., Гавриков А.В., Самохин А.А., Смирнов В.П., Хомяков В.П. // Ядерная Физика и Инжиниринг. 2014. 5. 944.
- 5. Aymar R., Barabaschi P., Shimomura Y. // Plasma Physics and Controlled Fusion. 2002. 44. 519.
- 6. *Ллуэллин-Смит К.*, На пути к термоядерной энергетике // Материалы лекции, прочитанной 17 мая 2009 года в ФИАНе.
- 7. Семенов И., Энергетика будущего: управляемый термоядерный синтез. Что такое термоядерный реактор ИТЭР и почему так важно его создание? // Научно-популярная лекция, прочитанная в 2008 году в ФИАНе.

УДК 539.194

Термодинамические функции нейтрального и положительного иона димера аргона

М.А. Мальцев, И.В. Морозов, Е.Л. Осина

Московский физико-технический институт (государственный университет) Объединённый институт высоких температур РАН

Заряженные двухатомные соединения с аргоном играют важную роль в массспектрометрии с аргоновыми источниками плазмы, такими как лазерная абляция индуктивно связанной плазменной масс-спектрометрии (LA-ICP-MS) [1]. Массспектрометрия с индуктивно связанной плазмой (ИСП-МС) является одним из наиболее чувствительных методов атомного анализа, вследствие эффективности и надежности ИСП как источника атомных ионов. Состав газа плазмы – существенный фактор в определении эффективности ионизации ИПС. Несмотря на то, что для создания ИСП был использован ряд газов: N₂, O₂, He, Ne и воздух, чаще всего для генерации плазмы выбирают аргон. Этот газ химически инертен, что сводит к минимуму образование нежелательных молекулярных ионов при атомном анализе. Однако молекулярные соединения аргона все же присутствуют в плазме. Помехи, возникающие при образовании соединений Аг с ионами из элементов в матрице менее заметны, но могут приводить к значительным осложнениям. Для количественной оценки распространенности аргидов-элементов в ИПС, оценки степени их опасности при проявлении спектральных помех и нахождения условий снижения уровня аргидов необходимы данные о их термодинамических свойствах. Однако, в литературе информация о таких свойствах отсутствует.

Расчеты термодинамических свойств по молекулярным постоянным чаще всего проводятся в приближении «гармонический осциллятор-жесткий ротатор» (Harmonic Oscillator and Rigid Rotor). При этом предполагается наличие единственного минимума на потенциальной кривой межатомного взаимодействия, окрестности которого описываются квадратичной формой от колебательных координат. Однако в случае двухатомных молекул с ван-дер-ваальсовским типом связи, для которых энергии диссоциации и частоты

колебаний низки, а межъядерные расстояния велики, использование «гармонического приближения» становится невозможным. Именно к такому классу соединений относятся нейтральный и положительно заряженный димер аргона (Ar_2^+, Ar_2) . В этих случаях возникает необходимость использования в расчетах разного вида негармонических потенциалов межатомного взаимодействия. Ранее данным методом нами были рассчитаны термодинамические функции для двухатомных соединений аргона с кобальтом и ванадием $(ArCo^+, ArV^+)$ [2]. Настоящая работа посвящена исследованию свойств Ar_2 и Ar_2^+ .

В работе [3] авторы, используя метод DFT, провели расчеты потенциальной энергии взаимодействия нейтрального и ионизированного атома аргона с учетом спинорбитального взаимодействия. Каждую рассчитанную потенциальную кривую взаимодействия мы аппроксимировали двумя видами кривых, полученных на основе представленных в данной работе молекулярных постоянных (рис. 1). В качестве аппроксимирующих кривых были выбраны следующие потенциалы:

1) потенциал Морзе, который обычно используется для описания ковалентных связей в молекуле:

$$V(r) = D(1 - \exp(-b(r - r_e))^2;$$
(1)

2) потенциал Гульберта–Гиршфельдера [4], который является модификацией потенциала Морзе и учитывает девять молекулярных постоянных:

$$V = D\left[\left(1 - \exp(-x)\right)^{2} + cx^{3} \exp(-2x)(1 + bx)\right], \qquad x = \frac{\omega_{e}}{2\sqrt{B_{e}D}} \left[\frac{r - r_{e}}{r_{e}}\right],$$

$$b = 2 + \left[\frac{7}{12} + \frac{Da_{2}}{a_{0}}\right]/c, \quad c = 1 + a_{1}\sqrt{\frac{D}{a_{0}}}, \quad a_{0} = \frac{\omega_{e}^{2}}{4B_{e}}, \\ a_{1} = -1 - \frac{\alpha_{e}\omega_{e}}{6B_{e}^{2}}, \quad a_{2} = \frac{5}{4}a_{1}^{2} - \frac{2}{3}\frac{\omega_{e}x_{e}}{B_{e}}.$$
(2)

Для расчета статистических сумм по заданным потенциальным кривым нами была разработана программа Partition Function, которая использует стороннюю программу Level 8.2 [5].

Термодинамические функции молекул Ar_2 и Ar_2^+ рассчитаны, суммируя для каждого электронного состояния колебательно-вращательные статистические суммы. Дополнительно получены значения энтальпий образования $\Delta_f H^{\circ}(0)$ и $\Delta_f H^{\circ}$ (298.15 K) для данных газов.



Рис. 1. Зависимость потенциальной энергии межатомного взаимодействия для трех электронных состояний Ar₂⁺ от межъядерного расстояния

- 1. Witte T.M., Houk R.S. Metal argide (MAr+) ions are lost during ion extraction in laser ablationinductively coupled plasma-mass spectrometry // Spectrochimica Acta. Part B. 2004. V. 69. P. 25–31.
- Maltsev M.A., Kulikov A.N., Morozov I.V. Thermodynamic Properties of Vanadium and Cobalt Argide Ions, VAr+ and CoAr+ // Journal of Physics: Conference Series. 2016. V. 774. P. 012023.
- 3. *Michels H.H., Hobbs R.H., Wright L.A.* Electronic Structure of the Noble Gas Dimer Ions. I. Potential Energy Curves and Spectroscopic Constants // J. Chem. Phys. 1978. V. 69. P. 5151.
- 4. *Hulburt H.M., Hirschfelder J.O.* Potential Energy Functions for Diatomic Molecules // J. Chem. Phys. 1941. V. 9. P. 61.
- Le Roy R.J., Level 8.2: A Computer Program for Solving the Radial Schrödinger Equation for Bound and Quasibound Levels, University of Waterloo Chemical Physics Research Report CP-663 (2014). http://leroy.uwaterloo.ca/programs/
УДК 533.9...15

Оценка внешнего воздействия на диамагнитные частицы в статической магнитной ловушке при температурах ~0,1 К при отсутствии диссипации

П.А. Карпышев¹, Р.Е. Болтнев^{2,3}, М.М. Васильев^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Объединенный институт высоких температур РАН

³Филиал Института энергетических проблем химической физики им. В.Л. Тальрозе РАН

Для изучения кулоновских систем, образованных заряженными диамагнитными частицами в статической магнитной ловушке, необходимо иметь возможность изменять энергию системы. В диссипативных системах вывод энергии происходит через различные каналы (трение, излучение и т.п.), и полная энергия системы постепенно понижается. Отдельный интерес представляет исследование кулоновских систем с варьируемой величиной полной энергии без её диссипации. В такой системе удобно исследовать изменение параметров (число частиц, образующих систему, их скорость и межчастичное взаимодействие, коллективные эффекты) в зависимости от величины полной энергии.

В представленной работе предполагается исследовать кулоновскую систему заряженных диамагнитных частиц в статической магнитной ловушке в вакууме при температурах ниже 1 К. Рассмотрено несколько возможных методов воздействия на заряженные диамагнитные частицы в магнитной ловушке и оценена их эффективность для увеличения их кинетической энергии посредством придания им дополнительного импульса при помощи:

• термофоретической силы;

- давления света;
- импульсное возмущение магнитного поля ловушки электромагнитом.

Температура внутри криостата <1 К, давление равно 10^{-3} Па. При данной температуре производительность криостата составляет ~10 мкВт. Для проведения эксперимента были выбраны шарики диаметром 200 мкм (37% свинца и 63% олова). При температуре эксперимента частицы находятся в сверхпроводящем состоянии и являются диамагнитными.

Проведено сравнение рассчитанных величин ускорения, придаваемых частицам каждым из вышеупомянутых методов.

УДК 539.2

Исследование автомодельности свойств газа с потенциалом мягких сфер

А.А. Барсукова^{1,2}, П.Р. Левашов^{1,2}, Д.В. Минаков^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Объединённый институт высоких температур РАН

Модельные потенциалы мягких и твердых сфер широко используются для описания свойств различных систем. В частности, потенциал твердых сфер применяется для построения теории возмущений в простых жидкостях [1], а также для приближенного вычисления энтропии в молекулярно-динамических расчетах [2]. В данной работе для вычисления энтропии предлагается вместо потенциала твердых сфер использовать потенциал мягких сфер [3]. Известно [4], что термодинамические свойства системы, атомы которой взаимодействуют с потенциалом мягких сфер, обладают свойством автомодельности, что можно использовать для отыскания удобных аппроксимаций. В работе будут представлены результаты молекулярно-динамического моделирования термодинамических свойств, коэффициента самодиффузии и автокорреляционной функции для газа мягких сфер. Будут также обсуждаться различные автомодельные зависимости этих свойств для различных приложений.

- 1. Kang H.S., Lee C.S., Ree T., Ree F.H. A perturbation theory of classical equilibrium fluids // J. Chem. Phys. 1985. V. 82. P. 414-423.
- Lin S.-T., Blanco M., Goddard W.A. III. The two-phase model for calculating thermodynamic properties of liquids from molecular dynamics: Validation for the phase diagram of Lennard-Jones fluids // J. Chem. Phys. 2003. V. 199. P. 11792.
- 3. Hoover W.G., Marvin R., Johnson K.W., Henderson D., Barker J.A., et al. Soft Sphere Equation of State. // J. Chem. Phys. 1970. V. 52, N 10. P. 4931 4934.
- 4. Hoover W.G., Stell G., Goldmark E., Degani G.D. Generalized van der Waals equation of state // J. Chem. Phys. 1975. V. 63. N 12. P. 5434 5438.

УДК 533.9.072

О подъемной силе, возникающей при взаимодействии синтетической струи симметричного актуатора с набегающим потоком

В.М. Бочарников, В.В. Володин, В.В. Голуб

Объединенный институт высоких температур РАН

В работах по управлению подъемной силой и лобовым сопротивлением крыла при помощи ДБР использовались асимметричные актуаторы [1, 2]. Создаваемая актуатором пристеночная струя была направлена навстречу набегающему потоку. В такой постановке, повышения подъемной силы удалось добиться при скорости набегающего потока 10 м/с и $Re = 20\ 000\ [1]$. При той же скорости и $Re = 200\ 000\ изменения$ подъемной силы не наблюдалось [2].

Использование симметричного актуатора для управления подъемной силой крыла может оказаться более эффективным. Под воздействием сильного электрического поля происходит ионизация окружающего газа и его ускорение в направлении, перпендикулярном поверхности актуатора, что приводит к образованию синтетической струи, направленной перпендикулярно поверхности крыла в заданной области. При взаимодействии синтетической струи с набегающим потоком под углом близким к 90° происходит отрыв потока от поверхности крыла, с последующим его присоединением и сохранением безотрывности обтекания «виртуального» профиля, обладающего большей кривизной (см. рис. 1). Как следствие, возникает подъемная сила, значительно превосходящая тягу самой струи. При этом существенное влияние на процесс оказывают не только тягово-энергетические характеристики струи, но и геометрия расположения актуатора на поверхности крыла.

В данной работе было проведено исследование зависимости подъемной силы от скорости набегающего потока для различных вариантов установки симметричного актуатора на крыло в широком диапазоне углов атаки. Показано, что можно как увеличивать, так и уменьшать подъемную силу крыла, что позволяет создавать моменты по крену.



Рис. 1. Теневая фотография обтекания профиля NACA-0015, оснащенного симметричным плазменным актуатором. Угол атаки *α* = 0, скорость потока *v* = 10 м/с, *Re* ~ 50000

- 1. Feng L.H., Choi K.S., Wang J.J. Flow control over an airfoil using virtual Gurney flaps // Journal of Fluid Mechanics. 2015. V. 767. P. 595–626.
- 2. *Leroy A.* [*et al.*]. Comparison of flow modification induced by plasma and fluidic jet actuators dedicated to circulation control around wind turbine airfoils // Journal of Physics: Conference Series. IOP Publishing. 2016. V. 753, N 2. P. 022012.

УДК 537.525.5

Исследование эффекта термоэмиссионной вставки на параметры диффузной вакуумной дуги с оксидным катодом

Р.А. Усманов^{1,2}, Н.Н. Антонов^{1,2}, Г.Д. Лизякин¹, А.Д. Мельников^{1,2}, В.П. Полищук¹, И.М. Ярцев¹

¹Объединенный институт высоких температур РАН ²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Диффузная вакуумная дуга рассматривается в качестве перспективного варианта источника плазмы, для целей плазменной переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ). Известно, что в данном разряде на термоэмиссионном катоде путем изменения его рабочей температуры возможно управлять значением температуры электронов в плазме и тем самым добиться требуемой степени ее ионизации и зарядового состава [1]. Этот эффект связан с его малой по сравнению с единицей величиной отношения потоков испаряющихся атомов к потоку электронов эмиссии – ξ (например, для гадолиния $\xi \sim 10^{-2}$).

Одним из веществ, моделирующих процессы испарения и ионизации UO₂ для отработки метода плазменной сепарации ОЯТ, является диоксид церия СеО₂. Измеренная величина атом-электронного отношения для него близка к 1. Исследования разряда с катодом из CeO₂ показали, что в нем образуется плазменный поток со средним зарядом тяжелых частиц около 0.9, однако кратность ионов плазмы, как и напряжение горения разряда, не поддается значительному варьированию [2]. Для усиления эффекта управления характеристиками, в том числе зарядовым составом, плазменной струи в дуге на оксидном использовать конструкции дополнительный катоде было предложено В его термоэмиссионный элемент с целью уменьшения значения эффективного атомэлектронного отношения. В качестве такого элемента использовался LaB₆.

Вакуумный дуговой разряд инициировался при остаточном давлении < 10 мПа. Катод дуги находился в молибденовом тигле и представлял собой комбинацию спеченного CeO₂ и эмиттера электронов из LaB₆, расположенных таким образом относительно друг друга, чтобы пары оксида достигали поверхности эмиссионного элемента. Катод имел систему электронно-лучевого подогрева, поддерживающую его при рабочей температуре > 2.2 кК, при которой давления насыщенных паров оксида (p_s (*CeO*₂) \approx 10 – 100 Па) было достаточно для существования разряда. Анодом дуги являлась радиационноохлаждаемая молибденовая пластина. Длина межэлектродного промежутка составляла 3 см. Типичные параметры разряда: ток I = 30 - 100 А, напряжение U = 10 - 30 В, температура катода T = 2.2 - 2.4 кК.

В данной работе приведены результаты исследования влияния дополнительного эмиттера электронов на условия зажигания разряда в парах CeO₂, на его напряжение горения и мощность, поступающую в катод из плазмы. Также в условиях избыточной электронной эмиссии с дополнительного катода исследованы условия перехода разрядного промежутка из режима вакуумного диода в режим дугового разряда.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда, проект № 14-29-00231.

- 1. Амиров Р.Х., Ворона Н.А., Гавриков А.В., Лизякин Г.Д., Полищук В.П., Самойлов И.С., Смирнов В.П., Усманов Р.А., Ярцев И.М. Исследование вакуумной дуги с диффузной катодной привязкой как источника плазмы для плазменной сепарации ОЯТ и РАО // Физика плазмы. 2015. Т. 41. № 10. С. 877 883.
- 2. Усманов Р.А., Амиров Р.Х., Ворона Н.А., Гавриков А.В., Лизякин Г.Д., Полищук В.П., Першин Д.А., Самойлов И.С., Смирнов В.П., Ярцев И.М. Экспериментальное исследование диффузной вакуумной дуги на катоде из оксида церия, моделирующего оксид урана для задач плазменной сепарации ОЯТ // Всероссийская (с международным участием) конференция «Физика низкотемпературной плазмы» ФНТП-2017. Сборник тезисов. 2017. С. 264.

УДК 537.533.9

Аномально высокая зарядка дисперсных частиц в электронно-пучковой плазме

И.А. Рябов^{1,2}, Е.А. Кононов², М.М. Васильев^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный институт) ²Объединенный институт высоких температур РАН

Для экспериментального изучения зарядки пылевых макрочастиц в электроннопучковой плазме была проведена модификация и юстировка экспериментальной установки, основным элементом которой является электронная пушка с системой электромагнитных линз для управления и позиционирования электронного пучка.

Через газодинамическое окно электронный пучок вводится в вакуумную камеру, откачка которой осуществляется посредством последовательно соединенных форвакуумного и турбомолекулярных насосов. Контроль давления в экспериментальной камере производится емкостным датчиком типа Баратрон. Инжектированные частицы под действием силы тяжести пролетают через электронный пучок и приобретают заряд. В результате кулоновского отталкивания наблюдается разлет, который регистрируется цифровыми видеокамерами.

На основе анализа видеозаписи разлета пылевых макрочастиц проведены оценки их зарядов, а также сравнение полученных значений с результатами аналитических расчетов.

УДК 533.9.01

Эффект нелинейного экранирования и перенормировки макрозарядов в комплексной плазме

И.А. Мартынова^{1,2}, И.Л. Иосилевский^{1,2}, А.А. Шагайда³

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Объединённый институт высоких температур РАН ³Исследовательский центр им. М.В. Келдыша

Обсуждаются границы применимости известной фазовой диаграммы комплексной плазмы с потенциалом в форме Юкавы [1] в координатах к–Г (к – структурный параметр, Г – параметр кулоновской неидеальности). С использованием приближенных уравнений состояния [1, 2] выявлено существование на фазовой диаграмме [1] обширных областей с отрицательной сжимаемостью и отрицательным давлением [3, 4], свидетельствующих о термодинамической неустойчивости однородного состояния такой плазмы и неизбежности расслоения на фазы разной плотности. В работе анализируется применимость исходного допущения, использованного при получении фазовой диаграммы [1], а именно линеаризованного (дебаевского) экранирования макроионов микроионами, приводящего к эффективному дебаевскому потенциалу взаимодействия макроионов. Уравнение

Пуассона–Больцмана решается в ячейке Вигнера–Зейтца с центральным макроионом. Рассчитаны параметры нелинейного экранирования макроионов в ячейке. Обнаружено два эффекта в результате расчета: (1) – приблженное деление всех микроионов на два сорта: связанных и свободных, (2) – значительное уменьшение эффективного («видимого») заряда Z* в сравнении с исходной величиной заряда макроиона Z за счет экранирования плотной сферой связанных микроионов. Оба эффекта ведут к перенормировке исходных параметров к и Г в эффективные параметры к* и Г* (к* < к, Г* < Г). В работе делается предположение, что при учете нелинейного экранирования фазовые состояния системы сохраняются и остаются теми же, что и в исходной фазовой диаграмме [1], но в новых переменных к* и Г*. В работе обсуждаются эффекты, возникающие вследствие нелинейного экранирования.

Литература

- 1. Hamaguchi S., Farouki R.T. Dubin D. Triple Point of Yukawa Systems // Phys. Rev. E. 1997. V. 56. P. 4671–4682.
- 2. *Khrapak S.A., Khrapak A.G., Ivlev A.V. and Morfill G.E.* Simple estimation of thermodynamic properties of Yukawa systems // Phys. Rev. E. 2014. V. 89. P. 023102.
- 3. *Martynova I.A., Iosilevskiy I.L.* Features of phase transitions in models of complex plasma // Contrib. Plasma Phys. 2016. V. 56, N 56. P. 432–441.
- 4. *Martynova I.A., Iosilevskiy I.L.* On Melting Density Gap and Non-congruence of Phase Transitions in Models of Dusty and Colloid Plasma // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. V. 653. P. 012141.

УДК 621.793.1

Источник плазмы смеси веществ Pb и Ag, моделирующих компоненты отработавшего ядерного топлива, на основе несамостоятельного дугового разряда в магнитном поле

Н.Н. Антонов^{1,2}, Р.А. Усманов^{1,2}, Г. Д. Лизякин², А.В. Гавриков², В.П. Смирнов², А.Д. Мельников^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Объединённый институт высоких температур РАН

Сегодня ядерная энергетика нуждается В обновлении подходов И совершенствовании технологий, связанных с переработкой, транспортировкой и хранением отработавшего ядерного топлива (ОЯТ). Производственные мощности существующих технологий могут осуществить переработку всего топлива, выгружаемого из реакторов, однако только экстенсивным путем с производством дополнительных жидких отходов разной степени радиоактивности. По этой причине задача разработки альтернативных методов переработки ОЯТ является актуальной. На сегодняшний день среди разрабатываемых методов можно выделить газофторидный, пироэлектрохимический [1] и плазменный [2]. Концепцию плазменной сепарации, предложенную в [2, 3], можно разделить на три главных этапа: перевод твердого вещества в плазменный поток, разделение потока в специальной конфигурации электрического и магнитного поля по группам масс, сбор разделенных веществ на коллекторы. Метод подразумевает, что ионы в плазменном потоке должны быть низкоэнергетичными и однозарядными, а степень ионизации потока должна быть близкой к 100% [3, 4]. Важной особенностью метода является компенсация объемного заряда сепарируемого потока в буферной плазме ВЧразряда (частота около 5 МГц, давление остаточных газов от 1 мТорр до 1·10⁻² мТорр, индукция магнитного поля до 2 кГс).

Создание производительных источников, обеспечивающих перевод конденсированного вещества в плазменное состояние, является актуальной задачей для развития метода плазменной сепарации. В данной работе, в качестве источника плазмы веществ, моделирующих ОЯТ (серебра (107,9 а.е.м.) и свинца (207,2 а.е.м.)), была рассмотрена плазма диффузного дугового разряда в магнитном поле с накаливаемым

катодом (LaB₆). Инициация разряда осуществлялась в парах серебра, свинца и смеси этих веществ. Испарение производилось тигельным индукционным нагревом. Были получены вольтамперные характеристики разряда, осуществлен анализ спектров излучения потока плазмы в области за анодом и произведены измерение параметров плазменной струи с помощью двойного зонда. Минимальная разность потенциалов между катодом и анодом достигала значения около 7 В при токе в промежутке около 1 А. При разности потенциалов в разрядном промежутке, близкой к 30 В (4,5 A) и 13 В (5,2 A), температура электронов в плазменной струе находилась на уровне 5–7 эВ и 1–3 эВ соответственно, при этом концентрация плазмы в струе принимала значения от 10^{11} см⁻³ до 10^{12} см⁻³. В экспериментах на смеси веществ было показано, что поддержание постоянной разности потенциалов в катод-анодном промежутке, не смотря на существенную разницу в давлении насыщенных паров модельных веществ, является возможным за счет управления термоэмиссионным током с катода. Контроль спектрального состава излучения плазмы позволил осуществить поиск режимов горения разряда в которых ионы кратности два не были обнаружены.

Полученные результаты свидетельствуют о возможности применения данного типа разряда для отработки метода плазменной сепарация ОЯТ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №14-29-00231-П).

Литература

- 1. Лавринович Ю.Г., Бычков А.В. Обращение с отходами неводных методов переработки отработавшего ядерного топлива // Дмитровград. Обзор НИИАР, 2012.
- Zhiltsov V.A., Kulygin V.M., Semashko N.N., Skovoroda A.A., Smirnov V.P., Timofeev A.V., Kudryavtsev E.G., Rachkov V.I., Orlov V.V. Plasma separation of the elements applied to nuclear materials handling // Atomic energy. 2006. V. 101, N 4. P. 755–759.
- Vorona N.A., Gavrikov A.V., A. A. Samokhin A.A., Smirnov V.P., Khomyakov Y.S. On the possibility of reprocessing spent nuclear fuel and radioactive waste by plasma methods // Physics of atomic nuclei. 2015. V. 78, N 14. P. 1624–1630.
- Амиров Р.Х., Ворона Н.А., Гавриков А.В., Лизякин Г.Д., Полищук В.П., Самойлов И.С., Смирнов В.П., Усманов Р.А., Ярцев И.М. Исследование вакуумной дуги с диффузной катодной привязкой как источника плазмы для плазменной сепарации ОЯТ и РАО // Физика плазмы. 2015. Т. 41, № 10. С. 877–883.

УДК 537.613

Профиль потенциала плазмы в отражательном разряде с секционными катодами

Я.А. Мурзаев^{1,2}, Г.Д. Лизякин¹, А.В. Гавриков^{1,2}, В.П. Смирнов¹

¹Объединенный институт высоких температур РАН

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

В настоящее время одной из актуальных задач атомной энергетики является переработка отработавшего ядерного топлива (ОЯТ), необходимая для перехода к замкнутому топливному циклу. Решение этой проблемы позволит увеличить вовлечение ресурсов топлива реакторов за счет выделения минорных актиноидов для повторного использования рефабрикованного топлива. Перспективным методом такой переработки является плазменная сепарация ОЯТ [1]. Одним из ключевых вопросов для плазменных методов, базирующихся на применении масс-фильтра Окавы Т. [2, 3] и сепаратора Смирнова В.П. [4], является создание заданного пространственного распределения электростатического потенциала в плазме с замагниченными электронами. В цилиндрической камере, заполненной плазмой и помещенной в магнитное поле параллельное ее оси, должно быть создано радиальное электрическое поле заданной конфигурации. Для этого применяются электроды, расположенные на торцах

цилиндрической камеры. В данной работе на каждом торце расположено семь соосных электродов (внешний диаметр сборки 780 мм). Каждый из электродов имеет форму усеченного конуса. Торцевые электроды, находящиеся под отрицательным относительно земли потенциалом, в совокупности с заземленной боковой поверхностью цилиндрической камеры (длина 1,2 м диаметр 0,85 м) образуют геометрию отражательного разряда.

В данной работе рассмотрены различные конфигурации напряжений на торцевых электродах, методом плавающего зонда получено радиальное распределение потенциала плазмы, а методом двойного зона радиальное распределение концентрации плазмы и температуры электронов. Определена область наибольшего электрического поля и граница области «плотной» плазмы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №14-29-00231).

Литература

- 1. Vorona NA, Gavrikov A V, Samokhin A A, [et al.] // Physics of Atomic Nuclei. 2015. 78. 1–7.
- Cluggish B.P., Anderegg F.A., Freeman R.L., Gilleland J., Hilsabeck T.J., Isler R.C., Lee W.D., Litvak A.A., Miller R.L., Ohkawa T., Putvinski S., Umstadter K.R., and Winslow D.L. // Phys. Plasmas. 2005. 12. 057101. 0.

3. Ohkawa T. and Miller R.L. // Phys. Plasmas. 2002. 9. 5116.

4. Smirnov V.P., Samokhin A.A., Vorona N.A., and Gavrikov A.V. // Plasma Phys. Rep. 2013. 39. 456.

УДК 533.9...15

Расчёт влияния градиента температуры вдоль стенки газоразрядной трубки на ориентацию одномерных плазменно-пылевых структур при криогенных температурах

Е.А. Алексеевская¹, Р.Е. Болтнев^{2,3}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Объединенный институт высоких температур РАН

³Филиал Института энергетических проблем химической физики им. В.Л. Тальрозе РАН

В экспериментах по исследованию плазменно-пылевых структур в тлеющем разряде постоянного тока при криогенных температурах было обнаружено, что при низких температурах (< 160 K), одномерные структуры (цепочки) из частиц диоксида церия смещаются из центральной части страты на её периферию. Помимо этого, наблюдается отклонение оси цепочки от вертикали – её нижний конец имеет большее смещение от оси трубки по сравнению с верхним, причём величина отклонения увеличивалась с понижением температуры. Было предположено, что причиной отклонения может быть наличие градиента температур вдоль стенки газоразрядной трубки, охлаждаемой прокачкой холодных гелиевых паров в криостате, и соответственно изменение величины термофоретической силы, действующей на частицы, находящиеся на разной высоте.

В представляемой работе была исследована зависимость угла отклонения от температуры, при которой наблюдалась цепочка, и рассчитана зависимость величины термофоретической силы от положения частицы в цепочке.

Источник света на основе горения смеси порошков Al+CuO

С.Ю. Ананьев^{1,3}, А.Ю. Долгобородов^{1,2}, Б.Д. Янковский¹

¹Объединенный институт высоких температур Российской академии наук ²Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук ³Московский Физико-технический институт (Государственный университет)

Приведены экспериментальные результаты исследования горения стехиометрической смеси порошков алюминия и оксида меди, использованные затем для создания импульсного источника света с апертурой 400х400 мм. По оценкам, химическое взаимодействие компонентов такой смеси может происходить с выделением энергии 4 кДж/г в случае полного реагирования. Смеси реальных порошков имеют конечное значение площади контакта, что замедляет развитие реакции.

Для увеличения эффективной поверхности контакта реагентов и снижения энергетического порога инициирования реакции в ИХФ РАН (И.В. Колбанев) была проведена предварительная механоактивация смеси в течение от 2 до 20 минут. Оптимальным для смеси алюминиевой пиротехнической пудры ПП-2 и промышленного ХЧ порошка СиО оказалось время активации в течение 8 мин. Механоактивация приводит к образованию конгломератов из исходных компонентов и снижению температуры зажигания смеси. Как показывает микроскопия смеси, контактная поверхность компонентов в кластерах носит характер локальных очагов. В конечном счете, это сказывается на скорости и времени сгорания контрольной навески смеси заданной геометрической формы.

При инициировании реакции в произвольном очаге образуются ионизованные продукты реакции и поле излучения. Ионизация среды подтверждена измерениями проводимости области реакции. Излучение охарактеризовано пирометрической и оптической диагностиками. В силу естественного распределения по энергии только часть ионизованных продуктов оказывает инициирующее действие на окружающие «холодные» неоднородность выделения энергии очаги. Геометрическая при химическом взаимодействии между компонентами в плоском очаге приводит к разбросу кластеров в произвольных направлениях. В экспериментах получены однозначные свидетельства массового разлета как микро- и наночастиц конечных продуктов реакции, так и «горячих» и «холодных» кластеров разного размера. Зафиксировано инициирующее воздействие наиболее энергетичных кластеров через воздушные промежутки до 170 мм.

Разлет реагирующих кластеров средней энергии образует линию фронта области свечения. Например, сгорание навесок смеси массой 0,3 г на горизонтальной поверхности приводит к образованию области свечения до 2000 мм² в сечении за время ~ 1000 мкс.

Выгорание кластеров низкой энергии в тылу области свечения обеспечивает продолжительность времени высвечивания до 5000 мкс. Т.е. расширение области свечения обусловлено разлетающимися кластерами смеси и продолжением выделения химической энергии во всем ее объеме. С использованием четырехканального пирометра определена яркостная температуры области свечения ~3500 К. Изложенные представления и экспериментальные данные использованы для изготовления простого источника света на основе сгорания смеси порошков алюминия и оксида меди.

В основу конструкции источника положен модуль с апертурой 400х400 мм. В качестве источника излучения использована ленточная (1х10 мм) дорожка смеси длиной 380 мм с двумя точками инициирования. Глубина размещения дорожки смеси от апертуры – 200 мм. Масса смеси в дорожке модуля 9 г. Среднее значение линейной скорости горения смеси составляет 35 м/с.

Инициирование реакции в смеси осуществляется электроискровым способом с использованием генератора ГЗИ-6. Для повышения эффективности использования излучения в источнике установлен параболический рефлектор. Время расширения области свечения в данной конструкции до момента полного освещения экрана приближается к 1

мс при полной длительности свечения не менее 5 мс. Это делает некритичным выбор момента синхронизации с другими процессами.

Модуль прост в изготовлении и может применяться при фотографировании движения объектов в проходящем или отраженном свете. В отличие от источников [1,2] с использованием ВВ, сгорание механоактивированной смеси Al+CuO не сопровождается разрушением конструкции. Очистка рефлектора от продуктов реакции и монтаж новой ленты смеси позволяет использовать конструкцию вторично. Источник света из двух модулей использован нами для фотографирования процесса формирования и перемещения плотного потока микрочастиц со скоростью ~ 500 м/с. Фотографирование осуществлено камерой Cordin 222-16 с экспозицией 0,1÷1,0 мкс.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Теплофизика высоких плотностей энергии» и РФФИ (грант № 16-29-01030).

Литература

- 1. Герасимов С.И., Файков Ю.И., Холин С.А. Кумулятивные источники света. // Саров. ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2011, с. 327.
- 2. Буланов С.С., Есиев Р.У., Камруков А.С., Козлов Н.П., Морозов М.И., Росляков И.А. Взрывные плазменно-вихревые источники оптического излучения. // ЖТФ, 2010, т. 80, № 11, с. 87-95.

УДК 533.9.07

Диагностика и применение низкотемпературной плазмы диэлектрического барьерного разряда, генерируемого различными источниками

С.В. Брюзгин^{1,2}, М.М. Васильев², О.Ф. Петров²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Объединённый институт высоких температур РАН

В настоящее время низкотемпературная плазма имеет широкий спектр применений: антибактериальная и антигрибковая обработка, ускорение регенерации биологических тканей [1], улучшение характеристик посевного материала [2] и др.

В данной работе представлены результаты диагностики неизотермической низкотемпературной плазмы диэлектрического барьерного разряда атмосферного давления. Для получения плазмы использовались две конфигурации генератора, формирующие гелиевую плазменную струю (см. рис. 1а) и плоский разряд в воздушной атмосфере (см. рис. 1б).

Для данных конфигураций были исследованы режимы генерации плазмы, в зависимости от управляющих параметров (напряжение, расстояние между электродами, скорость потока газа). Анализируя полученные данные, были выбраны режимы, подходящие для обработки биоматериалов. На полученных режимах произведена обработка посевного материала. Также данные исследования позволили обнаружить начальные значения управляющих параметров для осуществления генерации плазмы.

Исследование спектра и измерение концентрации активных компонент позволили изучить состав полученной плазмы и сделать предположение о возможных механизмах воздействия генерируемой плазмы на биообъекты. Для исследования безопасности применения плазмы относительно различных биоматериалов были проведены измерения профиля распределения температур и уровня УФ-излучения при генерации.



Рис 1. а) Гелиевая плазменная струя, б) плоский разряд в воздушной атмосфере

- 1. Kos S., Blagus T., Cemazar M., Filipic G., Sersa G., Cvelbar U. Safety aspects of atmospheric pressure helium plasma jet operation on skin: In vivo study on mouse skin // PLoS One. 2017. eCollection 2017.
- 2. *Ling L.* [*et al.*]. Cold plasma treatment enhances oilseed rape seed germination under drought stress // Scientific Reports. 2015. N 5.

УДК 533.9.01

Расчет зарядово-динамических характеристик пылевых частиц для экспериментов в околоземном космическом пространстве

А.Д. Богданов, Е.А. Лисин, М. М. Васильев, О.Ф. Петров

Объединенный институт высоких температур РАН

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Роль пыли в астрофизике чрезвычайно важна, так как пыль составляет значительную долю всей твёрдой материи. В космическом пространстве пыль встречается в солнечных и планетарных туманностях, газопылевых облаках, образующихся в результате взрыва сверхновых, в межзвёздном веществе, молекулярных облаках, околосолнечных пылевых кольцах и астероидах [1]. Помимо этого, космическая пыль (в том числе на земной орбите) влияет на электронную аппаратуру космических аппаратов.

Пылевые частицы на различных расстояниях от поверхности Земли подвергаются воздействию солнечного ветра и солнечного ультрафиолетового излучения, вызывающего фотоэмиссию, вследствие чего возникает поверхностный заряд и электрические поля вблизи поверхности. Помимо этого, частицы испытывают на себе воздействие электронных и ионных потоков окружающей плазмы; большую роль играет процесс вторичной электронной эмиссии. Для понимания процессов, происходящих с космической пылью, необходимо обеспечить формирование крупномасштабных объемных пылевых облаков, моделируя внешние факторы космического пространства. Поэтому формирование пылевых облаков частиц непосредственно в открытом космосе имеет большие перспективы исследования.

Космический эксперимент «Пыль-УФ» ставит целью получение и изучение плазменно-пылевых образований, в том числе индуцированных УФ-излучением Солнца (фотоионизационная пылевая плазма) в космическом пространстве. Первоначально для проведения эксперимента планируется задействовать транспортно-грузовой корабль «Прогресс». Диагностика плазменно-пылевых образований будет проводится как с помощью оптической визуализации, так и путем зондирования в радиочастотном диапазоне.

В рамках подготовки к космическому эксперименту «Пыль-УФ» были проведены количественный анализ и численное моделирование процессов зарядки и динамики

пылевых частиц на различном удалении от Земли (от ионосферы до Луны). Расчеты были выполнены для различных параметров окружающей плазмы (различные слои ионосферы и магнитосферы Земли, невозмущенный солнечный ветер) и пылевой компоненты, а также различных условий освещенности. Были учтены процессы фото- и вторичной электронной эмиссии, а также ионные и электронные токи на поверхности частиц из окружающей плазмы. В результате были получены зависимости среднего (равновесного) заряда пылевой частицы от ее высоты над поверхностью Земли для различных параметров частиц. Были получены новые численные данные о динамике разлета пылевых частиц в околоземном космическом пространстве для различных начальных условий задачи.

Также был проанализирован случай разреженной (оптически прозрачной) двухкомпонентной плазмы, состоящей из пылевых частиц и фотоэлектронов, эмитированных частицами в результате воздействия на них солнечного УФ-излучения, и была посчитана зависимость среднего равновесного заряда от концентрации для различных размеров частиц.

Литература

1. *Horanyi M.* Charged dust dynamics in the solar system // Laboratory for Atmospheric and Space Physics, University of Colorado, Boulder. 1996. P. 383-418.

УДК 533.9...15

Моделирование теплообмена в криогенном гелиевом разряде постоянного тока в вертикальной трубке, охлаждаемой сверхтекучим гелием

А.И. Седунов¹, Р.Е. Болтнев^{2,3}, М.М. Васильев^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Объединенный институт высоких температур РАН ³Филиал Института энергетических проблем химической физики им. В.Л. Тальрозе РАН

В литературе по криогенному разряду постоянного тока обычно предполагается, что температуры нейтральной и тяжёлой ионной компонент плазмы примерно равны температуре стенки трубки, охлаждаемой криогенной жидкостью. Основываясь на реальных экспериментальных данных, мы оценили возможный перегрев газообразного гелия в центральной (по оси) части разрядной трубки. Радиус разогретой части (в виде цилиндра) был взят равным радиусу наблюдаемой плазменно-пылевой структуры – 2 мм. Внутренний диаметр трубки – 20 мм. Давление в трубке составляло 4 Па, а температура стенки, охлаждаемой сверхтекучим гелием, – 2 К. Мощность, выделяемая через поверхность цилиндра, определялась напряжением между электродами, 3,2 кВ и током разряда, 20 мкА. Межэлектродное расстояние составляло 40 см.

Оценки возможного разогрева газа в центральной части были сделаны в приближении отсутствия конвекции и равномерного тепловыделения по длине межэлектродного расстояния. Оба использованных метода расчёта (по формуле теплопроводности цилиндрического слоя и на основе кинетической теории газов) дали близкие по величине значения и показали, что в рассмотренном случае температура газа в центральной области разрядной трубки может превышать температуру стенки трубки на 9–10 К. Учёт теплопроводности самой стенки стеклянной трубки практически не влияет на полученную величину разогрева.

Модификация поверхности пылевых частиц в плазме ВЧ-разряда

С.А. Гуртовой^{1,2}, Е.А. Кононов², М.М. Васильев^{1,2}, О.Ф. Петров^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный институт) ²Объединенный институт высоких температур РАН

В настоящей работе представлены результаты экспериментальных исследований эволюции структуры пылевых частиц в результате модификации их поверхности в высокочастотном газовом разряде. Анализ результатов, полученных методом растровой электронной микроскопии, состояния поверхности для исходных пылевых частиц и частиц, отобранных из газового разряда, показал изменение их состава.

Таким образом, экспериментально наблюдаемые изменения пылевой структуры при различных временах ее экспозиции в газовом разряде могут быть связаны с изменением характеристик самих пылевых частиц. Экспериментально полученные видеоданные обрабатывались посредством оригинальных программных средств, в результате чего были получены координаты пылевых макрочастиц и их скорости для каждого момента времени. На основе этих данных были получены парные корреляционные функции, и восстановлен эффективный параметр неидеальности пылевой структуры [1] в зависимости от времени ее нахождения в газовом разряде.

Было экспериментально обнаружено уменьшение межчастичного расстояния в плазменно-пылевой структуре, которое может быть связано с модификацией поверхности частиц в газоразрядной плазме.

Литература

1. Vaulina O. S., Dranzhevski I. E. Transport of macroparticles in dissipative two-dimensional Yukawa systems // Physica Scripta. 2006. V. 73. P. 577–586.

УДК 533.922

Моделирование кильватерной волны, генерируемой ультрарелятивистским протонным сгустком

Г.С. Мишура, Н.Е. Андреев

Московский физико-технический институт (государственный университет) Объединённый институт высоких температур РАН

В работе проведено моделирование кильватерной волны в плазме, генерируемой протонным сгустком, с целью дальнейшей внешней инжекции электронов в волну, их захвата и ускорения до ультрарелятивистских энергий. Моделирование проводилось путём численного решения уравнений Максвелла и уравнений идеальной холодной электронной жидкости [1]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \operatorname{div}(n\vec{v}) = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \vec{p}}{\partial t} = e\vec{E} - mc^2\vec{V}\gamma, \tag{2}$$

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = -4\pi (en\vec{v} + \vec{j}_b) - \frac{c^2}{e} \operatorname{rotrot} \vec{p},$$
(3)

$$\gamma = \sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}},\tag{4}$$

$$J_b = n_b q_b v_b, \tag{5}$$

где *n* – концентрация электронов плазмы, \vec{v} – скорость электронов плазмы, \vec{p} – их импульс, *e* – заряд электрона, $\vec{J_b}$ – ток ионного драйвера. Система уравнений (в безразмерных переменных) решалась матричной прогонкой за несколько ньютоновских итераций [2]. Энергия протонного сгустка в эксперименте – 450 ГэВ, концентрация

электронов в плазме 7·10¹⁴ см⁻³, поперечные размеры сгустка $k_p \sigma = 1$ при $k_p = 49,7$ см⁻¹. Условия эксперимента приближены к реальному эксперименту AWAKE, проводимому в CERN [3]. Структура потенциала кильватерной волны на различных расстояниях от протонного сгустка представлена на рис. 1. Из рис. 1 видно, что в результате нелинейной эволюции краевые по радиусу области кильватерной волны по мере удаления от драйвера начинают обгонять приосевую область волны. Такое распределение потенциала способствует захвату внешне инжектированных электронов волной и дальнейшему их ускорению.



Рис.1. Профиль потенциала кильватерной волны в координатах (*z*, *ρ*).Изображения (а), (б) и (в) демонстрируют распределение потенциала в конце, середине и начале волны соответственно

Работа выполнена при поддержке программой фундаментальных исследований Президиума РАН.

Литература

- 1. *Koshelev A.A., Andreev N.E.* Nonlinear structure of wakefield generated by relativistic intense ion bunch // XXXI International Conference on Equations of State for Matter (ELBRUS2016), Journal of physics: Conference Series. 2016. 774.
- Andreev N.E., Chizhonkov E.V., Gorbunov L.M. Numerical modeling of the 3D nonlinear wakefield excited by a short laser pulse in a plasma channel // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modeling. 1998. V. 13. N 1. P. 1–11.
- 3. *Gschwendtnerb E., Adlir E., Amorimf L.* AWAKE, The Advanced Proton Driven Plasma Wakefield Acceleration Experiment at CERN // AWAKE Collaboration. 2015.

УДК 533.95

Влияние самофокусировки на процессы захвата и ускорения электронов в плазменной волне, генерируемой субтераваттным лазерным импульсом

В.С. Попов^{1,2}, Л.П. Пугачёв^{1,2}, Н.Е. Андреев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Объединённый институт высоких температур РАН

Кильватерные плазменные волны, генерируемые фемтосекундными высокоинтенсивными лазерными импульсами, представляют большой интерес для ускорения электронов до высоких энергий. Создание источников высокоэнергичных электронов для инжекции в лазер-плазменный ускоритель было рассмотрено в работах [1, 2]. Целью настоящей работы является изучение механизмов генерации кильватерных плазменных полей и исследование влияния эффекта релятивисткой самофокусировки лазерного импульса на процессы инжекции и ускорения электронов в плазменной волне. Численные расчёты были проведены с использованием трёхмерного PIC-кода («particle-incell») [3], при этом энергия лазерного импульса (40 мДж) и распределение плотности плазмы были выбраны в соответствии с экспериментом [2]. Параметры расчётов были следующими: длина лазерного импульса на половине интенсивности составляла 15 мкм (50 фс), радиус фокального пятна на уровне 1/e² составлял 8,4 мкм, максимальная интенсивность в фокусе была равна 9,4 · 10¹⁷ Вт/см². Распределение плотности водородной плазмы вдоль направления распространения лазерного импульса было гауссовым с характерной шириной, равной 200 мкм, максимум плотности составлял $n_{\text{max}}=6,6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ($n_{\text{max}}/n_{\text{cr}} = 0,059$), где n_{cr} – критическая плотность плазмы $n_{\text{cr}} = m_e \omega^2 / (4\pi e)$ (ω – плазменная частота, c – скорость света, m, e – масса и заряд электрона).

Основной результат настоящей работы следующий: когда лазерный импульс в процессе своего распространения в неоднородной плазме достигает области, в которой релятивистской мощность лазерного импульса превышает критическую для самофокусировки, происходит самофокусировка лазерного импульса и укручение его переднего фронта. На рис. 1 показана зависимость ширины лазерного импульса (на половине высоты по интенсивности) и максимального значения лазерного поля на оси от времени распространения импульса, т. е. пройденного им расстояния. Вертикальными штрихпунктирными линиями на рис. 1 отмечена область самофокусировки, в которой лазерный импульс начинает сжиматься в поперечном направлении и достигает максимального сжатия и максимума поля на оси импульса. Рост интенсивности и укручение переднего фронта лазерного импульса в процессе самофокусировки ведут к развитию самомодуляционной неустойчивости лазерного импульса, эффективной генерации кильватерной плазменной волны, инжекции и ускорению захваченных электронов (рис. 2). Рисунок 3 демонстрирует хорошее соответствие энергетического спектра ускоренных электронов, полученного в нашей работе (для максимальной плотности $n_{\text{max}}/n_{\text{cr}} = 0,25$), измеренному в эксперименте [2].



Рис. 1. Зависимость ширины лазерного импульса на половине высоты по интенсивности (тёмная кривая), максимального лазерного поля на оси (светлая кривая) от расстояния, пройденного импульсом от левой границы области. Пунктирной линией изображено начальное распределение плотности электронов. Вертикальные штрихпунктирные линии обозначают область самофокусировки



Рис. 2. Фазовая плоскость (X, P_x) для электронов в момент времени *ct* = 380 мкм. На рисунке виден захват электронов в несколько периодов плазменной волны и их ускорение до энергии ~ 10 МэВ



Рис. 3. Спектр ускоренных электронов для максимальной плотности $n_{\text{max}}/n_{\text{cr}} = 0.25$. Кружки – экспериментальные данные [2], сплошная линия – РІС-моделирование

- 1. Пугачёв Л.П., Андреев Н.Е., Левашов П.Р., Мальков Ю.А., Степанов А.Н., Яшунин Д.А. Генерация квазимонохроматических пучков ускоренных электронов при взаимодействии слабоконтрастного интенсивного фемтосекундного лазерного излучения с краем металлической фольги // Физика плазмы. 2015. Т. 41. № 7. С. 588–599.
- 2. Goers A.J., Feder G.A., Miao B., Salehi F., Wahlstrand J.K., and Milchberg H.M. Multi-MeV Electron Acceleration by Subterawatt Laser Pulses // Physical Review Letters. 2015. PRL. 115. 194802.
- Pukhov A.J. Three-dimensional electromagnetic relativistic particle-in-cell code VLPL (Virtual Laser Plasma Lab) // Plasma Physics. 1999. V. 61. P. 425–433.

УДК 533.922

Использование гибридных методов для моделирования многостадийного лазерно-плазменного ускорения

Д.В. Пугачёва¹, Н.Е. Андреев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Объединённый институт высоких температур РАН

Многостадийное лазерно-плазменное ускорение является перспективной схемой для ускорителей, использующихся в экспериментах по физике высоких энергий [1]. В данной работе проведено численное моделирование ускорения сгустка электронов и эволюции их характеристик в двух последовательных ускорительных стадиях. Особое внимание было уделено сохранению начального эмиттанса и поляризации спина пучка электронов, поскольку эти параметры существенным образом влияют на результаты эксперимента [2]. В каждой стадии взаимодействие плазмы с фемтосекундным лазерным импульсом, генерирующим кильватерные ускоряющие и фокусирующие поля, описывалось с помощью уравнений гидродинамики и уравнений Максвелла, а движение ускоряемого поляризованных электронов сгустка определялось уравнениями релятивистской динамики и прецессии спина каждого электрона.

В процессе ускорения релятивистский электронный пучок подвергается бетатронным колебаниям и испускает синхротронное излучение, которое влияет на динамику движения электронов и их поляризацию. Модель для численного моделирования ускорения поляризованных электронов была описана в работе [3]. В этой работе для описания влияния синхротронного излучения частиц была включена сила радиационного торможения в форме Ландау–Лифшица. В симуляциях электронный пучок ускорялся в предварительно сформированном плазменном канале с начальным нормализованным эмиттансом $\varepsilon_{nm} = \gamma_0 k_\beta \sigma_r^2$ [4], где γ_0 – начальный гамма-фактор электронов, k_β – усредненное по длине ускорительной стадии волновое число бетатронных колебаний, а σ_r – характерный поперечный размер пучка. Такое значение эмиттанса является согласованным с усредненными фокусирующими силами, действующими на частицы в процессе ускорения, что обеспечивает сохранение его величины в процессе ускорения, в то время как несогласованный эмиттанс равномерно нарастает и стремится к согласованному значению (см. рис. 1). Для сохранения эмиттанса и поляризации пучка при транспортировке между ускорительными стадиями использовались адиабатически уменьшающаяся плотность плазмы и возрастающий радиус канала [5].

Разработанный и реализованный пакет программ с использованием гибридных методов моделирования позволил изучить эволюцию эмиттанса и поляризации пучка электронов при многостадийном лазерно-плазменном ускорении и может быть использован для оптимизации процесса ускорения и определения конечной деполяризации ускоренных электронов.



Рис. 1. Изменение нормализованного эмиттанса пучка в процессе ускорения в зависимости от средней энергии электронов. Сплошная и штрихпунктирная линии соответствуют случаям с согласованными начальными значениями эмиттанса при σ_r = 4,2 мкм и σ_r = 2,1 мкм соответственно. Пунктирная линия соответствует случаю с несогласованным начальным эмиттансом при σ_r = 4,2 мкм

Работа выполнена при поддержке программой Президиума РАН № 27 «Фундаментальные проблемы решения сложных практических задач с помощью суперкомпьютеров»

Литература

- Leemans W., Esarey E. Laser-driven plasma-wave electron accelerators // Phys. Today. 2009. V. 62. N 3. P. 44.
- 2. *Moortgat-Pick G.* [*et al.*]. Polarized positrons and electrons at the linear collider // Phys. Rep. 2008. V. 460. P. 131.
- 3. *Pugacheva D.V., Andreev N.E.* Precession dynamics of the relativistic electron spin in laser-plasma acceleration // Quantum Electron. 2016. V. 46. N 1. P. 88.
- Esarey E. [et al.]. Synchrotron radiation from electron beams in plasma-focusing channels // Phys. Rev. E. 2002. V. 65. P. 056505.
- Tomassini P. and Rossi A.R. Matching strategies for a plasma booster // Plasma Phys. Control. Fusion. 2016. V. 58. P. 034001.

УДК 536.7

Восстановление изоэнтроп разгрузки тугоплавких металлов на основе первопринципных расчетов

М.А. Парамонов, Д.В. Минаков, П.Р. Левашов

Объединенный институт высоких температур РАН

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Изучение термодинамических свойств материалов в области высоких давлений и температур является одной из важнейших задач современной физики. Эти исследования необходимы, с одной стороны, для получения достоверной информации фундаментального характера, позволяющей построить широкодиапазонные уравнения состояния (УРС) различных веществ. С другой стороны, изучение свойств веществ и материалов способствует решению множества прикладных и фундаментальных задач, в том числе в энергетике, космических исследованиях, военной промышленности, астрофизике и физике твердого тела. УРС необходимы для связи между собой термодинамических параметров системы, таких как температура, давление, объём и др., и, в частности, для численного моделирования разнообразных процессов и явлений физики высоких плотностей. Динамические ударно-волновые эксперименты являются основным источником информации об УРС при высоких давлениях и температурах. Они также служат основой для проверки многочисленных теоретических моделей конденсированного вещества и плазмы.

Экспериментальное получение данных по ударному сжатию и изоэнтропическому расширению является сложной и очень дорогой задачей. Измерения кривых ударного сжатия сплошных и пористых образцов, изоэнтроп разгрузки и скорости звука за фронтом ударной волны дают (прямо или косвенно) ценную информацию о термодинамических свойствах вещества в широком диапазоне температур и давлений. Тем не менее теоретическая трактовка таких экспериментов довольно сложна, так как она требует знания УРС [1].

Развитие вычислительных методов и суперкомпьютеров позволило получить надежные данные о термодинамических свойствах веществ на основе первопринципных расчетов. В течение последних двух десятилетий метод квантовой молекулярной динамики (КМД) стал очень популярным. Он основан на теории функционала электронной плотности (DFT – density functional theory) [2], но также учитывает движение ионов. В настоящее время в расчетах могут использоваться более 1000 атомов [3–6], что позволяет изучать неупорядоченные системы и даже фазовые переходы [3, 6]. Это делает КМД перспективным методом для описания теплофизических свойств вещества в широком диапазоне параметров.

Задачей данной работы является восстановление кривых изоэнтропического расширения на основе данных КМД моделирования двумя различными методами для выявления преимуществ и недостатков каждого ИЗ них. Для выполнения первопринципного моделирования используется программный код VASP [7]. Анализируются точность и вычислительная сложность двух методов: метода Зельдовича [8] и метода повторных ударных адиабат. В рамках первого метода численно решается обыкновенное дифференциальное уравнение для температуры. Второй метод основан на свойстве касания второго порядка ударной адиабаты Гюгонио и изоэнтропы разгрузки [9].

В работе исследовались изоэнтропы разгрузки, соответствующие экспериментальным данным по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых сплошных и пористых образцов молибдена и вольфрама. Данные вещества являются тутоплавкими металлами и благодаря своим свойствам имеют важное прикладное значение. Эти металлы и сплавы на их основе являются основными проводниковыми материалами в электровакуумной промышленности, добавляются в стали, работающие при высоких температурах, используются в качестве жаропрочных материалов в самолетостроении, ракетной и космической технике, атомной энергетике и др. По результатам исследования отмечено хорошее согласие КМД и экспериментальных данных. Из первопринципных расчетов были получены уникальные данные о температуре на кривых изоэнтропического расширения. Результаты данной работы будут интересны широкому кругу исследователей, в особенности занимающимся первопринципными расчетами термодинамических свойств веществ и созданием широкодиапазонных уравнений состояний, а также могут найти применение в современной промышленности.

Литература

- 1. *Fortov V.E., Lomonosov I.V.* Equations of State of Matter at High Energy Densities // The Open Plasma Physics Journal. 2010. V. 3. P. 122–130.
- 2. *Martin R.M.* Electronic structure: basic theory and practical methods. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- 3. *Hern'andez E.R., Rodriguez-Prieto A., Bergara A., Alf'e D.* First-Principles Simulations of Lithium Melting: Stability of the bcc Phase Close to Melting // Phys. Rev. Lett. 2010. V. 104. P. 185701.
- 4. *Pozzo M., Desjarlais M.P., Alf e D.* Electrical and thermal conductivity of liquid sodium from firstprinciples calculations // Phys. Rev. B. 2011. V. 84. P. 054203.
- 5. Alf e D., Pozzo M., Desjarlais M. P. Lattice electrical resistivity of magnetic bcc iron from firstprinciples calculations // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. P. 024102.
- 6. *Pozzo M., Alf e D.* Melting curve of face-centered-cubic nickel from first-principles calculations // Phys. Rev. B. 2013. V. 88. P. 024111.
- 7. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 558.
- 8. Зельдович Я.Б. // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. С. 1577.
- 9. Zel'dovich Y.B., Raizer Y.P. Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena / Ed. by *Hayes W.D., Probstein R.F.* Dover Publications, 2002.

УДК 533.9.082

Определение анизотропных сил взаимодействия между двумя пылевыми частицами в газовом разряде

А.А. Игнатьев, Е.А. Лисин, К.Б. Стаценко, О.Ф. Петров

Московский физико-технический институт (государственный университет) Объединённый институт высоких температур РАН

Одной из важных экспериментально нерешенных задач в пылевой плазме является результате пространственная структура кильватерного поля, возникающего В взаимодействия микрочастиц с плазменным потоком. В отличие от наземных экспериментов, на орбите Земли есть возможность исследовать взаимодействие пылевых частиц в более широком диапазоне параметров плазмы, поскольку в данных условиях не нужна компенсация гравитации. Например, недавно в ходе экспериментов на установке ПК-4 («Плазменный кристалл-4») в условиях микрогравитации были обнаружены струннообразные анизотропные плазменно-пылевые структуры, формирующиеся благодаря особому типу взаимодействий между микрочастицами (индуцированному полем разряда постоянного тока с переменной полярностью) [1]. Однако экспериментальные методы, используемые для изучения межчастичного взаимодействия в наземных лабораториях, не могут быть применены на борту космической станции, поскольку они используют влияние гравитации и специальные лазерные манипуляции, которые недоступны на установке ПК-4, запущенной на МКС в 2014 году.

Наш новый метод, основанный на корреляционном анализе броуновского движения пылевых частиц в плазме, позволяет, не прибегая к внешнему воздействию, изучать межчастичные взаимодействия как в наземных лабораторных условиях, так и на установке ПК-4 в условиях микрогравитации. Корреляционный подход дает возможность вычислять производные силы взаимодействия между частицами, образующими сильно коррелированную цепную структуру.

Экспериментальная апробация данного метода проводилась на пылевых цепочках, образующихся в диффузных краях страт газового разряда постоянного тока. Для этого произведена сборка и отладка экспериментальной установки с разрядом постоянного тока. Установка состоит из вакуумной трубки, расположенной вертикально, к трубке подведены электроды и подключены два насоса: форвакуумный и турбомолекулярный. Пылевые частицы микронных размеров сбрасывались из специального контейнера, находящегося внутри вакуумной трубки, и в зависимости от типа буферного газа, его давления и разрядного тока могли формировать различные структуры в стратах разряда. Для визуализации пылевые частицы подсвечивались лазерным лучом.

В ходе экспериментов были выяснены параметры разряда, при которых возможно существование вертикальной конфигурации из двух пылевых частиц. Для анализа траекторий движения пылевых частиц была проведена их видеосъемка с помощью высокоскоростной камеры высокого разрешения при разных давлениях и токах разряда. При этом параметры видеосъемки (пространственное разрешение, продолжительность и частота кадров видеозаписи) были выбраны такими же, как на установке ПК-4. Полученные в ходе эксперимента видеофайлы были обработаны оригинальным программным обеспечением. Были посчитаны значения следующих корреляторов координат и проекций скоростей частиц: $\langle \xi_{1(2)}^2 \rangle$, $\langle \xi_1 \xi_2 \rangle$, $\langle \dot{\xi}_1 \dot{\xi}_2 \rangle$, $\langle \xi_1 \dot{\xi}$

Был проведен расчет производных сил взаимодействия частиц с помощью системы

линейных уравнений, описывающих связь между корреляторами и градиентами сил, действующих в системе [2]:

$$(\left\langle \xi_{1(2)}^{2} \right\rangle - \left\langle \xi_{1}\xi_{2} \right\rangle)a_{1(2)}^{(\xi)} + \left\langle \xi_{1(2)}^{2} \right\rangle b_{1(2)}^{(\xi)} = -M\left\langle \dot{\xi}_{1(2)}^{2} \right\rangle, \tag{1}$$

$$\left(\left\langle \xi_{2(1)}^{2}\right\rangle - \left\langle \xi_{1}\xi_{2}\right\rangle\right)a_{1(2)}^{(\xi)} - \left\langle \xi_{1}\xi_{2}\right\rangle b_{1(2)}^{(\xi)} \pm M\left\langle \dot{\xi}_{1}\xi_{2}\right\rangle \nu = M\left\langle \dot{\xi}_{1}\dot{\xi}_{2}\right\rangle,\tag{2}$$

$$\left\langle \xi_{1} \dot{\xi}_{2} \right\rangle (a_{1(2)}^{(\xi)} + b_{1(2)}^{(\xi)}) + \left\langle \xi_{2} \dot{\xi}_{1} \right\rangle (a_{1(2)}^{(\xi)} + b_{1(2)}^{(\xi)}) - 2M \left\langle \dot{\xi}_{1} \dot{\xi}_{2} \right\rangle \nu = 0, \tag{3}$$

где $a_{1(2)}^{(\xi)} = \partial F_{2,1(1,2)}^{(\xi)} / \partial \xi$ и $b_{1(2)}^{(\xi)} = \partial F_{ex1(2)}^{(\xi)} / \partial \xi$ – производные по ξ направлению ξ -ых компонент сил взаимодействия и внешних сил; ν – коэффициент трения частиц изза их столкновений с нейтралами окружающей среды, M – масса частиц. Используя соотношение для связи силы $F_{1,2}$, с которой нижняя частица действует на верхнюю, с её производной, а также уравнение баланса сил, были определены значения сил взаимодействия между частицами:

$$F_{1,2} = \left\langle z_2 - z_1 \right\rangle a_1^{(X)}, \tag{4}$$

$$F_{2,1} = \left\langle z_1 - z_2 \right\rangle b_1^{(Z)} - Mg \left(1 - b_1^{(Z)} / b_2^{(Z)} \right) - F_{1,2} b_1^{(Z)} / b_2^{(Z)} , \qquad (5)$$

где ось *z* совпадает с линией, проходящей через точки положений равновесия двух частиц. Отметим, что, в отличие от лабораторных условий, на установке ПК-4 силы взаимодействия для пары частиц являются взаимными [1], т.е. $F_{1,2} = F_{2,1}$, что упрощает диагностику и уменьшает ошибку измерения.

Анализ результатов работы показал, что апробированный в лабораторных условиях метод может быть использован для определения сил межчастичного взаимодействия в экспериментах «Плазменный кристалл – 4» на борту МКС.

Работа была поддержана Министерством образования и науки РФ (грант МК-2930.2017.8).

Литература

- 1. Ivlev A.V., Thoma M.H., Rath C., Joyce G. and Morfill G.E. // Phys. Rev. Lett. 2011. 106. 155001.
- 2. Лисин Е.А., Ваулина О.С., Петров О.Ф. Проверка сил межчастичного взаимодействия в неидеальных системах // ЖЭТФ. 2017. 151. 4.

УДК 537.53

Спектральная диагностика пылевой плазмы в положительном столбе газового разряда низкого давления

А.В. Шоненков^{1,2}, А.Д. Усачев², А.В. Зобнин², А.М. Липаев², В.И. Молотков², О.Ф. Петров^{1,2}, М.Ю. Пустыльник³, М.А. Тома³, Х.М. Томас³

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Объединённый институт высоких температур РАН

³Институт физики материалов в космосе, Германский аэрокосмический центр

Экспериментально исследовалось влияние пылевого облака на распределение интенсивностей спектральных линий неона, излучаемых положительным столбом газового разряда низкого давления в неоне. Эксперимент проводился на российско-европейской научной аппаратуре «Плазменный кристалл – 4», установленной Международной космической станции (МКС) [1]. Газовый разряд осуществлялся в стеклянной П-образной газоразрядной трубке с внутренним диаметром 3 см и общей длиной около 85 см. Давление неона составляло 60 Па, а величина разрядного тока 1 мА. В этих условиях положительный столб равномерно заполнял весь газоразрядный промежуток без образования страт. Пылевые монодисперсные пластиковые частицы диаметром 3,4 мкм вбрасывались в положительный столб вблизи катода и дрейфовали в электрическом поле столба к аноду. Для остановки облака использовался режим переключаемой полярности, при котором полярность разряда менялась с частотой 500 Гц. Испускаемые плазмой столба эмиссионные спектры неона снимались в центре газоразрядной трубки с помощью спектрометра OceanOptics USB2000+ с 2048-пиксельной ПЗС-линейкой в диапазоне 400-1000 нм с разрешением 1,5 нм и экспозицией 0,5 с. В этом оптическом диапазоне преобладали спектральные линии, соответствующие 3р→3s электронным переходам в атоме неона. В данной работе исследовалось влияние пылевых облаков различного диаметра на интенсивность спектральных линий неона и проводилось обсуждение полученных результатов.

Типичный вид эмиссионных спектров неона представлен на рис. 1. В ходе экспериментов было зафиксировано значительное влияние наличия пылевого облака не только на абсолютную интенсивность спектральных линий неона, но и на их относительную интенсивность. Причем это влияние зависит от диаметра пылевого облака и его положения относительно наблюдаемой области плазмы. Присутствие пылевого облака вызывает резкое увеличение интенсивности 3р→3s спектральных линий неона в области самого облака, причем чем больше диаметр облака, тем более значительна величина $R_i = I_{i,cl} / I_{i,0}$, где $I_{i,0}$ – интенсивность *i*-й спектральной линии в положительном столбе без пылевого облака, а I_{i,cl} – интенсивность излучения той же линии в присутствии облака. На рис. 2 приведена зависимость отношения *R* для различных диаметров облака. Видно, что в присутствии пылевого облака интенсивность излучения растет пропорционально диаметру пылевого облака. Такое увеличение интенсивности излучения является следствием самосогласованного увеличения электрического поля в облаке для разряда питаемого в режиме стабилизации разрядного тока. Увеличение поля приводит к дополнительному разогреву электронов и увеличению скорости ионизации. Наиболее интересна зависимость отношения R_i от энергии верхнего *i*-го уровня, соответствующего данной і-й спектральной линии, которая также свидетельствует о росте электронной температуры внутри пылевого облака.

Эксперименты на научной аппаратуре МКС «Плазменный кристалл – 4», установленной Международной космической станции, выполнены при поддержке Роскосмоса и Европейского космического агентства.



Рис. 1. Спектр излучения положительного столба газового разряда постоянного тока в неоне



Рис. 2. Зависимость среднего отношения интенсивностей спектральных линий неона *R*, соответствующих переходам 3р → 3s, от диаметра пылевого облака



Рис. 3. Зависимость среднего отношения интенсивностей спектральных линий неона *R* от энергии верхних уровней соответствующих спектральных линий

1. *Pustylnik M.Y.* [*et al.*]. Plasmakristall-4: New complex (dusty) plasma laboratory on board the International Space Station // Rev. Sci. Instrum. 2016. V. 87. P. 093505.

УДК 538.911

Формирование в коллоидных системах кластеров диамагнитных макрочастиц в магнитных ловушках

А.О. Белозерцев^{1,2}, М.М. Васильев², О.Ф. Петров²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ² Объединенный институт высоких температур РАН

Настоящая работа посвящена исследованию активных частиц в коллоидных системах [1]. Интерес к таким системам может быть вызван изучением фазовых переходов. Хорошо известно свойство диамагнитных частиц выталкиваться в область минимума магнитного поля [2]. Таким образом, для удержания пылевых структур и экспериментального изучения сильновзаимодействующих кулоновских систем может быть использована левитация диамагнитных тел в неоднородном стационарном магнитном поле. В то же время вследствие силы тяжести в наземных экспериментах, при работе с частицами графита удаётся сформировать кластер, состоящий всего из нескольких частиц [3]. Эксперименты по изучению динамического поведения дисперсных частиц графита в неоднородном магнитном поле также проводились в условиях микрогравитации на PC MKC [4].

В представленной работе используется метод формирования кластеров частиц в лабораторных условиях в коллоидной суспензии, когда сила тяжести, в соответствии с законом Архимеда, частично или полностью может быть скомпенсирована выталкивающей силой. Для формирования пылевой структуры коллоидная система помещается в неоднородное магнитное поле с минимумом магнитной индукции в ее центральной части. В зависимости от жидкости частицы коллоида могут быть как нейтральными, так и заряженными. Фазовый переход в такой системе может инициироваться различными механизмами, например, при помощи лазерного излучения. При этом макрочастицы могут достаточно эффективно рассеивать свет. Возможность видеорегистрации положения пылевых частиц в каждый момент времени создает уникальную возможность изучения исследуемой системы на кинетическом уровне.

Литература

- 1. *Арансон И.С.* Активные коллоиды // УФН. 2013. Т. 183. С. 87–102.
- 2. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т. 3. Электричество М.: Наука, 1977. 687 с.
- 3. *Савин С.Ф.* [*u др*.]. Формирование кулоновских кластеров заряженными диамагнитными макрочастицами в неоднородном магнитном поле // Письма в ЖТФ. 2009. Т. 35. № 24. С. 42–51.
- 4. *Petrov O.F.* [*et al.*]. Coulomb clusters of dust particles in a cusp magnetic trap under microgravity conditions // Physical Review E. 2012. V. 86. P. 036404.

УДК 533.9.

О моделировании процессов переноса в двумерной системе взаимодействующих частиц при воздействии лазерного излучения

И.И. Файрушин

Объединенный институт высоких температур РАН

В последние десятилетия исследованию систем из сильновзаимодействующих пылевых частиц в плазме газового разряда посвящено огромное число работ. Это

обусловлено тем, что пылевая плазма является уникальном объектом исследования процессов переноса, самоорганизации, фазовых переходов на кинетическом уровне путем непосредственного или с привлечением несложной оптической техники наблюдения за движением отдельных частиц. Получаемые при исследовании данные могут быть полезны для самых разных отраслей науки от физики конденсированного состояния до астрофизики [1].

В данной работе с использованием методов молекулярной динамики проведено моделирование процесса воздействия лазерного излучения на квазидвумерную систему взаимодействующих полимерных пылевых частиц. В модели предполагается, что частицы имеют одинаковый размер и состоят из одного вещества. Начальное расположение частиц равномерное. Потенциалом взаимодействия выбран потенциал Юкавы. Также на частицы действуют сила трения о нейтралы и случайная сила, определяющая термостат Ланжевена [2]. Предполагается, что сила ионного увлечения, термофоретическая сила и сила тяжести уравновешивают друг друга [3]. Кроме того, на частицы в выделенном направлении воздействует сила светового давления [3]. Величина данной силы определяется интенсивностью лазерного излучения и оптическими характеристиками вещества пылинок [3]. Выбранная квадратная двумерная область моделирования заполнялась частицами в количестве 2048 шт., с межчастичным расстоянием 100 мкм, радиус частиц выбран равным 1 мкм. Зарял на частицах принимался равным 1000 зарядов электрона, что соответствует данным многих работ, см., например, [4]. В результате проведения численных экспериментов обнаружено, что в зоне воздействия лазерного излучения происходит существенное ускорение диффузии частиц и формирование «течения» в направлении излучения. Выявлены зависимости времени установления зоны с преимущественно направленным движением частиц от параметра неидеальности системы и мощности лазерного излучения.

Литература

- Комплексная и пылевая плазма. Из лаборатории в космос / под ред. В. Фортова и Г. Морфилла. М.: Физматлит, 2012. 444 с.
- Клумов Б.А., Рубин-Зузич М., Морфилл Г.Е. Волны кристаллизации в пылевой плазме // Письма в ЖЭТФ. 2006. Т. 84. Вып. 10. С. 636–641.
- 3. Bin Liu, J. Goree, V. Nosenko, L. Boufendi Radiation pressure and gas drag forces on a melamineformaldehyde microsphere in a dusty plasma // Physics of Plasmas. 2003. V. 10, N 1. P. 9–20.
- 4. Ваулина О.С., Репин А.Ю., Петров О.Ф., Адамович К.Г. Кинетическая температура и заряд пылевой частицы в слабоионизованной газоразрядной плазме // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2006. Т. 129. № 6. С. 1118–1131.

Секция проблем безопасного развития атомной энергетики

УДК 621.039

Расчетный анализ влияния факторов формоизменения топливных элементов реактора ВВЭР-1000 на разновысотность твэлов и твэгов на ранних сроках эксплуатации

А.В. Борисов, А.А Сорокин, В.В. Лиханский, И.А. Евдокимов

АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ»

В настоящее время на энергоблоках АЭС с ВВЭР в составе ТВС используются топливные элементы с выгорающим поглотителем на основе оксида гадолиния – твэги. Опыт эксплуатации топлива с гадолинием указывает на повышенное удлинение твэгов по сравнению с твэлами после первой и второй топливных кампаний [1].

Особенностью термомеханического поведения твэла/твэга на ранних сроках эксплуатации является отсутствие плотного механического контакта между топливом и оболочкой. Механическое взаимодействие между топливным столбом и оболочкой может осуществляться посредством сжатого пружинного фиксатора, находящегося в компенсационном объеме твэла/твэга. На разновысотность твэлов и твэгов на ранних сроках эксплуатации могут влиять такие факторы, как пониженная линейная мощность и температура оболочки в твэге, меньшее давление газа под оболочкой твэга, пониженная дозовая нагрузка на оболочку твэга, различия в термомеханическом и микроструктурном поведении топливного столба твэла и твэга.

Пониженная температура оболочки и меньшая скорость набора повреждающей дозы в оболочке твэга на ранних стадиях облучения должны приводить к уменьшению скорости радиационно-термической ползучести и роста оболочки твэга. С другой стороны, меньшей мощности тепловыделения в твэге соответствует меньшее давление газа под оболочкой, и, как следствие, большая скорость ползучести оболочки под действием давления теплоносителя.

Еще одним фактором, влияющим на формоизменение твэла/твэга, является изменение длины топливного столба при облучении, приводящее к силе, растягивающей оболочку в аксиальном направлении вследствие воздействия пружины. Отличия в термомеханическом поведении топливного столба твэла и твэга могут быть обусловлены разной динамикой температуры топлива. В начале облучения температура топлива в твэге ниже, чем в твэле из-за пониженного тепловыделения. После выгорания поглощающих изотопов гадолиния ¹⁵⁵Gd, ¹⁵⁷Gd линейная мощность в твэге выходит на уровень, близкий к мощности твэла. При этом температура топлива в твэге может быть выше, чем в твэле вследствие пониженной теплопроводности топливных таблеток. Постепенное повышение мощности в твэге может приводить к меньшей по сравнению с твэлом фрагментации топлива. При растрескивании топливных таблеток происходит уменьшение температуры топлива, связанное с эффективным уменьшением зазора между топливом и оболочкой.

Отличия в удлинении топливного столба в твэле и в твэге могут быть также связаны с распуханием топлива вследствие образования газовых пор по границам топливных зерен. Размер топливных зерен в (U,Gd)O₂-топливе меньше, чем в чистом диоксиде урана. Так как границы зерен служат стоками для газовых продуктов деления, это может приводить к повышенному распуханию в горячих областях топлива и, как следствие, к большему удлинению топливного столба в твэге.

В работе проводится расчетный анализ влияния различных факторов на формоизменение твэлов и твэгов. Расчет удлинений твэгов и твэлов проводился на основе расчетной модели радиационно-термической ползучести оболочки [2]. Моделирование теплового поведения твэга проводилось с помощью кода РТОП-СА [3], разработанного в

АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ». Результаты расчетов показали, что удлинение твэлов при учете различий в температуре оболочки в дозовой нагрузке на оболочку и в давлении газа под оболочкой больше, чем удлинение твэгов на конец первого и второго года эксплуатации.

Наблюдаемое на практике повышенное удлинение твэга по сравнению с твэлом можно объяснить воздействием на оболочку со стороны топливного столба посредством пружинного фиксатора. Основными факторами, влияющими на ускоренное удлинение твэга, являются повышенная температура в твэге после выгорания поглощающих изотопов гадолиния, а также большее увеличение объема топлива вследствие образования газовых пор. В работе показано, что при учете всех факторов, определяющих формоизменение топливных элементов реактора ВВЭР-1000, можно объяснить наблюдаемый ускоренный рост твэгов по сравнению с твэлами на ранних сроках эксплуатации.

Литература

- Martina Mala, Seven years of inspections on TVSA-T fuel assemblies at TEMELIN NPP // 12th International Conference on WWER Fuel Performance, Modelling and Experimental Support 16–23 September 2017, Nessebar, Bulgaria.
- Sorokin A., Evdokimov I., Zborovskii V., Kanyukova V., Kozhan A., Likhanskii V., Maslova L., Ulibyshev K. Simulation of Stress Strain State and Dimensional Chages of WWWER Fuel Rods Applying Finite Element Method with the RTOP Code // Proceedings of the 10-th International Conference WWER Fuel Performance, Modelling and Experimental Support 7–14 September 2013 Sandanski, Bulgaria.
- 3. Sorokin, V. Likhanskii, I. Evdokimov, V. Zborovskii, O. Vilkhivskaya, S. Tokarev, K. Ulibyshev, A. Izhutov, S. Ilyenko, Yu. Kudrin, I. Kiseleva, A. Goryachev, Yu. Dolgov, A. Ugryumov, Modeling in support of experiments in the MIR reactor for justification of fission products release from failed fuel rods of advanced design and from (U,Gd)O₂ fuel// 12th International Conference on WWER Fuel Performance, Modelling and Experimental Support 16–23 September 2017, Nessebar, Bulgaria.
- M. Ieremenko, I. Ovdiienko Cross-checking of the TRANSURANUS burn-up model for Gd-dopped UO₂ WWER-1000 fuel based on results of HELIOS code // 10th International Conference on WWER Fuel Performance, Modelling and Experimental Support. 9–13 September 2013, Sandanski, Bulgaria.

УДК 519.633.2

Схема КАБАРЕ для численного моделирования процессов горения и детонации в двумерных областях

А.В. Данилин, А.В. Соловьев, А.М. Зайцев

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Решение задач о переходе горения в детонацию требует использования алгоритмов высокой точности на достаточно подробных сетках, что приводит к значительному объему вычислений и к необходимости использования технологий параллелизации расчетов. К алгоритмам высокой точности, обладающих высокой эффективностью распараллеливания, относится схема КАБАРЕ [1–3]. В настоящей работе используется модификация схемы КАБАРЕ для моделирования движения реагирующих газовых смесей с необратимой одностадийной химической кинетикой и учетом процессов диффузии, вязкости и теплопроводности в двумерных областях. Движение горючей смеси описывается уравнениями движения [4]:

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \frac{\partial \rho z u_j}{\partial x_j} = -AZ\rho \exp(-T_a/T) + \frac{\partial}{\partial x_j} D \frac{\partial z}{\partial x_j}, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j + \delta_{ij} p)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ij}, \quad \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial u_j (\rho E + p)}{\partial x_j} = \frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \lambda \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad (2)$$

где ρ – плотность горючей смеси, z – массовая доля топлива в смеси, u_i – вектор скорости, $p = (\gamma - 1)\rho C_v T$ – давление, γ – показатель адиабаты, C_v – теплоемкость при

постоянном объеме, $E = u^2 / 2 + C_v T + ZQ$ – сумма полной и скрытой тепловой энергии смеси, Q – тепловой эффект реакции, A – константа реакции, T_a – температура активации, $\exp(-T_a / T)$ – множитель Аррениуса, D – коэффициент диффузии, λ – коэффициент теплопроводности, $\tau_{ij} = \mu (\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i - 2/3 \partial u_k / \partial x_k \delta_{ij})$ – тензор вязких напряжений, μ – коэффициент динамической вязкости, δ_{ij} – символ Кронекера.

Левые части уравнений движения (1), (2) аппроксимированы при помощи подхода КАБАРЕ, обладающего консервативностью и вторым порядком аппроксимации на гладких решениях. В алгоритме используются два типа переменных – консервативные (далее обозначаются нижним индексом C) и потоковые. В схеме используются три временных слоя – начальный, полуцелый и новый, обозначаемые как n, n+1/2 и n+1.

Дискретизация конвективного переноса и химической реакции:

$$\frac{\tilde{U}_{C}^{n+1} - U_{C}^{n}}{\tau_{n}} + \frac{1}{2} \frac{(F^{n} + F^{n+1})}{\Omega_{C}} = \frac{1}{4} f_{C}^{n} + \frac{1}{2} f_{C}^{n+1/2} + \frac{1}{4} f_{C}^{n+1}.$$
(3)

Дискретизация диффузии, вязкости и теплопроводности:

$$\frac{U_{i+1/2}^{n+1} - \tilde{U}_{i+1/2}^{n+1}}{\tau_n} = \frac{D(\tilde{U}^{n+1})}{\Omega_C}, \frac{U_{i+1/2}^{n+1} - \tilde{U}_{i+1/2}^{n+1}}{\tau_n} = \frac{M(\tilde{U}^{n+1})}{\Omega_C}, \frac{U_{i+1/2}^{n+1} - \tilde{U}_{i+1/2}^{n+1}}{\tau_n} = \frac{\Lambda(\tilde{U}^{n+1})}{\Omega_C}, (4)$$

где τ_n – временной шаг, Ω_C – площадь данной ячейки, $U^T = (\rho z, \rho, \rho u, \rho v, \rho E)$ – вектор консервативных переменных, F – суммарный конвективный поток через все грани данной ячейки, $f^T = (-AZ\rho \exp(-T_a/T), 0, 0, 0, 0)$ – аппроксимация химической кинетики, $D(\tilde{U}^{n+1})$, $M(\tilde{U}^{n+1})$, $\Lambda(\tilde{U}^{n+1})$ – аппроксимации диффузии, вязкости и теплопроводности соответственно.

Расчет конвективного переноса и химической реакции производится совместно в соответствии с алгоритмом, предложенным в работе [3]: плотности и скорости на новом временном слое разрешаются явно, доля горючей смеси и температура – неявно (3). Учет диффузии, вязкости и теплопроводности производится отдельно с использованием явного подхода (4).

Алгоритм реализован на языке программирования C++ с использованием технологии параллельных вычислений MPI. Расчеты проводятся на суперкомпьютере Ломоносов-2.

В расчете используется прямоугольная область 18 см × 0,22 мм. На расчетной области вводится равномерная расчетная сетка, разрешающая вертикальный размер расчетной области 150 ячейками. Изначально область заполнена этилено-кислородной смесью при нормальных условиях со свойствами газа и параметрами химической кинетики, взятыми из работы [4]. Границы расчетной области – адиабатические стенки без проскальзывания. Инициализация горения производится заданием температуры 3000 К в полосе шириной 1 мм у левого конца расчетной области.

В ходе расчета фронт пламени сильно вытягивается из-за трения о стенки, что приводит к экспоненциальному росту его скорости и тепловыделения, из-за чего, в свою очередь, возникает волна сжатия, несколько опережающая фронт горения. При дальнейшем нарастании волны сжатия фронт горения, двигаясь по всё более прогретой области, продолжает ускоряться и догоняет фронт волны сжатия, что приводит к возникновению детонационной волны.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-31-00401.

- 1. Головизнин В.М., Самарский А.А. Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной // Математическое моделирование. 1998. Т. 10. № 1. С. 86–100.
- 2. Головизнин В.М., Самарский А.А. Некоторые свойства разностной схемы Кабаре // Математическое моделирование. 1998. Т. 10. № 1. С. 101–116.
- 3. Данилин А.В., Соловьев А.В., Зайцев А.М. Модификация схемы Кабаре для численного моделирования одномерных детонационных течений с использованием необратимой модели химической кинетики // Компьютерные исследования и моделирование. 2017. Т. 18. С. 1–10.
- 4. *Wenhu Han,* [*et. al.*] Flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in micro and macrochannels: An integrated mechanistic study // Combustion and Flame. 2017. V. 276. P. 285–298.

УДК 629.039.58

Аналитические и численные оценки теплоотдачи цилиндрических бассейнов металлического или оксидного расплава

Д.К. Валетов^{1,2}, Д.Д. Каменская¹

¹Институт безопасного развития атомной энергетики РАН ²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Возникновение бассейна расплава с характерными размерами порядка метра и объёмным источником тепла мощностью около 20 МВт возможно при тяжёлой аварии с расплавлением активной зоны водо-водяного реактора. В работе рассмотрен интегральный теплообмен в бассейне расплава в форме вертикального цилиндра. Воспроизведена (с несколько более общим набором коэффициентов) аналитическая модель [1, 2], в которой рассматривается задача о зависимости потока тепла на боковой границе металлического расплава от аспектного соотношения (отношения толщины слоя расплава к его радиусу H/R) – эффект фокусировки потока тепла. Модель основана на решении системы двух алгебраических уравнений, описывающих баланс тепла в терминах безразмерных коэффициентов теплообмена в радиальном и аксиальном направлениях. Проведено сравнение с модельным численным расчётом двумерного уравнения теплопроводности методом конечных элементов. Рассмотрены случаи жидкости, подогреваемой снизу потоком тепла, и жидкости с объемным тепловыделением при разных составах, соответствующих верхнему металлическому слою расслоённого расплава в корпусе реактора и оксидному слою расплава в устройстве локализации расплава для реактора BB3P-1200.

В рамках интегрального подхода температура при турбулентном теплообмене в расплаве может быть охарактеризована четырьмя величинами:

1. температурой турбулентного ядра конвективного течения – T_{bulk} ;

2. температурой верхней поверхности – T_{up} , с которой идет тепловое излучение;

3. температурой окружения для задания внешнего теплового излучения *T*_{out};

4. температурой боковой границы при конвективном граничном условии T_{lia} .

Система уравнений баланса тепла для металлического расплава (подогрев снизу) имеет следующий вид:

$$\begin{cases} FS_{\rm R} = \varepsilon \sigma \left(T_{\rm up}^4 - T_{\rm out}^4 \right) S_{\rm R} + \alpha_{\rm SD} \left(T_{\rm bulk} - T_{\rm liq} \right) S_{\rm H}, \\ \alpha_{\rm UP} \left(T_{\rm bulk} - T_{\rm up} \right) S_{\rm R} = \varepsilon \sigma \left(T_{\rm up}^4 - T_{\rm out}^4 \right) S_{\rm R}. \end{cases}$$
(1)

Для оксидного слоя (имеется объемное тепловыделение) она имеет сходный вид:

$$\begin{cases} q_{v}HS_{R} = \varepsilon\sigma\left(T_{up}^{4} - T_{out}^{4}\right)S_{R} + \alpha_{SD}\left(T_{bulk} - T_{liq}\right)S_{H}, \\ \alpha_{UP}\left(T_{bulk} - T_{up}\right)S_{R} = \varepsilon\sigma\left(T_{up}^{4} - T_{out}^{4}\right)S_{R}, \end{cases}$$
(2)

здесь *F* - плотность теплового потока (Вт/м²) в задаче о металлическом расплаве; q_{ν} – объемное тепловыделение в задаче об оксидном расплаве; *R* – радиус цилиндрической области; *H* – толщина слоя или высота цилиндра; ε – приведённая степень черноты поверхности, σ – константа Стефана–Больцмана, $S_{\rm R} = \pi R^2$ – площадь поперечного сечения, $S_{\rm H} = 2\pi R H$ – боковая площадь, $\alpha_{\rm UP} = \frac{N u_{\rm UP} (Ra) \cdot \lambda}{h}$ – коэффициент теплообмена по аксиальному направлению, $\alpha_{\rm SD} = \frac{N u_{\rm SD} (Ra) \cdot \lambda}{R}$ коэффициент теплообмена по радиальному направлению, $Nu = \frac{f \cdot D}{\lambda}$ – безразмерное число Нуссельта, характеризирующее теплообмен; $Ra = \frac{g\beta\Delta TD^3}{\nu\chi}$ – внутреннее число Рэлея, $\Pr = \nu/\alpha$ число Прандтля.

Зависимость Nu от Ra берётся в виде $Nu(Ra) \sim A \cdot Ra^{\beta} \cdot \Pr^{\gamma}$. Коэффициенты взяты из [3, 4]: $Nu = 0, 15 \cdot Ra^{1/3}$.

Параметры для металлического бассейна следующие: $\varepsilon = 0, 4$, $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} Bm \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}$, $\beta = 13 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, $\upsilon = 0,9 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ c}^{-1}$, $\chi = 4,7 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ c}^{-1}$, R = 2,2 m, H = 0,2-1 m, Pr = 0,13, $T_{\text{liq metal}} = 1600 \text{ K}$, $T_{\text{out}} = 273 \text{ K}$, $F = 400 \text{ kBt/m}^2$. Результаты расчетов и их сравнение для случая металлического расплава изображены на рис. 1. Совпадение численного расчёта и аналитической модели достаточное. Небольшое расхождение при малых *a* непринципиально.

Параметры для оксидной задачи: $\varepsilon = 0, 6$, $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Bt} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$, $\beta = 5 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, $\upsilon = 0,5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{c}^{-1}$, $\chi = 1,9 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{c}^{-1}$, R = 3,0 m, H = 1,2 m, Pr = 1, $T_{\text{liq oxides}} = 2000 \text{ K}$, $T_{\text{out}} = 1200 \text{ K}$, $q_v = 20 \text{ MBt/m}^2$. Результаты расчетов и их сравнение для оксидов отображены на рис. 2. Также видно хорошее соответствие.

Выводы

По полученным графикам можно сказать, что расчёт по реализованной аналитической модели хорошо соответствует результатам оригинальных работ, при этом в модель нетрудно ввести вместо условий по излучению с верхней границы расплава условие конвективного теплообмена, моделирующее залив расплава водой, а также варьировать другие коэффициенты. Проведено сравнение (вполне удовлетворительное) результатов расчётов по аналитической модели с двумерным расчётом теплообмена в расплаве кодом HEFEST, применяемым для анализа поведения расплава при тяжёлой аварии. Использованные аналитические соотношения пригодны в качестве средства качественной оценки тепловых потоков в задачах о теплообмене и не только в металлическом расплаве, но и для случая тепловыделяющего оксидного расплава, излучающего вверх или залитого водой, как в устройстве локализации расплава для реактора ВВЭР-1200.



Рис. 1. Кривые зависимостей тепловых потоков от аспектного соотношения для задачи с подогревом внизу



Рис. 2. Кривые зависимостей тепловых потоков от аспектного соотношения для задачи с объемным тепловыделением

- Theofanous T. G. and Liu C. In-vessel coolability and retention of a core melt // Nuclear Eng. & Design. 1997. V. 169. P. 1–48.
- 2. *Григорук Д.Г., Кондратенко П.С.* Эффект фокусировки в теплоотдаче многокомпонентной жидкости с внутренними источниками тепла // Теплофизика высоких температур. 2001. 39. № 1. С. 161–162.
- 3. *Churchill S.W., Chu H.H.S.,* Correlating equations for laminar and turbulent free convection from a vertical plate // J. Heat Mass Transfer. 1975. V. 18. P. 1323 1329.
- 4. *Theofanous T. G. and Liu C.* Natural convection experiments in a hemisphere with Rayleigh numbers up to 10¹⁵ // Proc. ANS National Heat Transfer Conf., Portland, Oregon. 1995. P. 349.

УДК 621.039

Анализ процесса погружения тепловыделяющего шара под действием силы тяжести

О.О. Корчагина

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Рассматривается шар радиуса *R*, заполненный ОЯТ и РАО, в котором за счет радиоактивного распада выделяется тепло, достаточное для проплавления окружающей геологической породы. Разность плотностей между шаром и расплавом предполагается достаточно большой, чтобы обеспечить непрерывное погружение шара под действием силы тяжести. При погружении шара расплавленная порода вытесняется вверх через узкий

слой (рис. 1). Основной задачей настоящей работы является определение скорости погружения *U* с учетом тепловыделения шара.

Следует отметить, что в работе [1] при $\varphi = \frac{1}{\pi}/2$ (рис. 1) толщина расплава δ стремится в бесконечность, что не соответствует действительности, в работе [2] был введен угол θ , это позволило получить реальные значения для δ .

Предполагается, что толщина расплава очень мала ($\delta \ll R$), и вязкая сила такая, что $\partial^2/\partial h^2 \ll \partial^2/\partial s^2$ (приближение теории смазки), перенос тепла путем конвективного потока пренебрежимо мал по сравнению с теплопроводностью в квазиустойчивом слое расплава, тогда поток жидкости расплава определяется следующим уравнением Навье-Стокса:

$$\mu \frac{\partial^2 u}{\partial s^2} = \frac{dp}{dh}.$$
 (1)

Граничные условия – u = 0 при s = 0 и δ , где u – тангенциальная скорость, μ – динамическая вязкость расплава, s – нормаль к шару, p – давление внутри расплава, h – касательная к шару. Проинтегрируем дважды (1):

$$u = \frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dh} (s - \delta)s.$$
⁽²⁾

Уравнение баланса массы в расплаве:

$$2\pi R \sin \varphi \int_0^\delta u ds = 2\pi R U \int_0^h \sin \varphi \cos \theta dh,$$
(3)

где φ – нормальный угол к поверхности шара, θ – нормальный угол к твердожидкой поверхности расплава. Подставляем уравнение (2) в (3):

$$\frac{dp}{d\varphi} = -\left(\frac{12\mu UR^2}{\delta^3 \sin\varphi} \int_0^{\varphi} \sin\varphi \cos\theta d\varphi\right).$$
(4)

Закон сохранения энергии в расплаве:

$$-\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial s}\right)_{s=\delta} \cos(\varphi - \theta) = \rho L_m U \cos \theta, \tag{5}$$

где $L_{\rm m} = L + c_{\rm p}(T_0 - T_{\rm m})$, $\lambda - коэффициент теплопроводности, <math>\rho -$ плотность расплава, L - скрытая теплота плавления, $c_{\rm p} -$ удельная теплоемкость среды. Считаем, что температура в расплаве аппроксимируется квадратичным полиномом по *s*, так же как в работе [1] толщина расплава находится из уравнения (5):

$$\delta = \alpha f(Ste) \frac{\cos(\varphi - \theta)}{U\cos\theta},\tag{6}$$

где Ste = $c_p (T_w - T_m)/L_m$, α – температуропроводность среды и

$$f(Ste) = \left(\sqrt{9Ste^2 + 280Ste + 400} - 3Ste - 20\right)/4.$$
 (7)

Если Ste мало, f(Ste) можно заменить на Ste. Когда температура расплава распределена по s, получаем из (5):

$$\delta = \alpha Ste \frac{\cos(\varphi - \theta)}{U\cos\theta}.$$
(8)

Действующая на шар сила

$$F = 2\pi R^2 \int_0^{\varphi} p \sin \varphi \cos \varphi d\varphi \,. \tag{9}$$

Если на шар не действуют внешние силы, то F эквивалентна $F = 4\pi R^3 (\rho_{\rm H} - \rho)g/3$, где $\rho_{\rm H}$ – плотность шара. Из рис. 1 мы можем получить следующую геометрическую связь

$$\frac{d\delta}{d\varphi} = (R+\delta)\tan(\varphi-\theta) \tag{10}$$

Безразмерные параметры определяем так: $\delta^* = \frac{\delta}{R}$; $p^* = \frac{pR^2}{\mu\alpha}$; $U^* = \frac{UR}{\alpha}$; $F^* = \frac{F}{\mu\alpha}$. Тогда уравнения (4), (6), (9) и (10) можно переписать следующим образом:

$$\frac{dp^*}{d\varphi} = -\frac{12U^* \int_0^{\varphi} \sin \varphi \cos \theta d\varphi}{\delta^{*3} \sin \varphi}, \qquad (11)$$

$$\delta^* = \frac{f(Ste)\cos(\varphi - \theta)}{U^*\cos\theta},\tag{12}$$

$$F^* = 2\pi \int_0^{\pi/2} p^* \sin \varphi \cos \varphi d\varphi , \qquad (13)$$

$$\frac{d\delta^*}{d\varphi} = (R + \delta^*) \tan(\varphi - \theta) , \qquad (14)$$

Граничные условия $p^* = 0$ при $\phi = -90$ и $\phi = 0$.

Уравнения (11) – (14) – новые основные уравнения, полученные для плавления вокруг горячего шара, где плавление вызвано разностью температур. Четыре неизвестных параметра (δ^* , p^* , θ и U^{*}) включены в эти уравнения. Для них нет аналитического решения. В работе [2] был предложен следующий алгоритм решения. Система решается методом итераций, критерий сходимости которой: если для заданной скорости сила плавучести уравновешивает силу трения, то скорость задана верно. В настоящей работе для решения алгебраических уравнений используется метод Ньютона.

Вышеизложенное решение не учитывало зависимость температуры поверхности шара от радиуса и мощности тепловыделения, T_w задавалась как известная константа.

В представленной работе была учтена зависимость T_w от радиуса и мощности тепловыделения шара согласно [1]:

$$T_{\rm w} = T_{\rm m} + \frac{4}{3} \frac{1}{\alpha c_{\rm p}} \left(\frac{\mu \rho_{\rm H}^4 H^4 R^5}{2g \triangle \rho L_{\rm m} \rho^4} \right)^{1/3}, \tag{15}$$

где $\Delta \rho = \rho_H - \rho$.

Для выбора режимных и конструктивных параметров шара (мощности тепловыделения и радиуса шара) необходимо иметь соответствующие зависимости: скорость погружения от радиуса шара для разных значений тепловыделения. Эти зависимости представлены на рис. 2.

Представлена обобщенная модель для процессов самопогружения тепловыделяющего шара с РАО и ОЯТ. Получена зависимость скорости погружения от геометрических и режимных параметров (радиуса шара, мощности тепловыделения).



Рис. 1. Физическая модель и система отсчета



Рис. 2. Зависимость скорости погружения шара от радиуса для разных значений мощности тепловыделения

- Steven H. Emerman, Turcotte D. L. Stoke's problem with melting // Heat Mass Transfer. 1983. V. 26. N 11. P. 1625–1630.
- 2. Wenzhen Chen, Bo Zhu, Zhiyun Chen, Haofeng Li, Fengrui Sun New analysis of contact melting of phase change material around a hot sphere // Heat Mass Transfer. 2008. 44: 281–286.

УДК 629.039.58

Численное моделирование теплоотдачи расплава в устройстве локализации ВВЭР-1200

Д.Д. Каменская¹, Д.К. Валетов^{1,2}

¹Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН ²Московский физико-технический институт (государственный университет) Введение

В сценариях тяжёлой аварии (ТА) с плавлением активной зоны водо-водяного реактора (далее речь пойдёт о реакторах типа ВВЭР) образуется высокотемпературный расплав компонентов активной зоны реактора. В ходе аварии расплав, содержащий тепловыделяющие продукты радиоактивного распада, перемещается в напорную камеру реактора и на днище корпуса. После проплавления корпуса расплав выходит в бетонную шахту и далее в новых проектах ВВЭР-1200 – в устройство локализации расплава (УЛР). В УЛР расплав растворяет компоненты жертвенного материала (смесь стали, оксидов алюминия и железа) и расслаивается на две фазы: оксидную и металлическую. В УЛР

металлическая фаза более плотная, чем оксидная (в основном это раствор окислов урана, циркония, алюминия, железа), она расположена под оксидной фазой, в которой сосредоточено основная часть (около 90%) остаточного тепловыделения (полной мощностью 10–20 МВт).

При численном моделировании удержания расплава в УЛР необходимо рассчитывать тепловую нагрузку от расплава на корпус УЛР, охлаждаемый снаружи водой. Это нужно для определения теплового режима корпуса и запаса до кризиса кипения в системе охлаждения. Задача сводится к определению распределения потока тепла на границе расплава и корпуса и его экстремумов на внешней границе корпуса. В расчётах используются упрощённые подходы к моделированию расплава, нуждающиеся в проверке. Эксперименты с двухслойным расплавом с тепловыделением в верхнем слое отсутствуют, и даже данные по теплообмену только оксидного слоя расплава очень ограничены. В данной работе проведена верификация модели теплопередачи расплава в версии расчётного кода HEFEST, разработанной для моделирования УЛР. Численный расчёт проверялся по балансной модели теплообмена [3] в цилиндрическом оксидном слое расплава. После этого проведен расчет моделирования удержания расплава в УЛР, который сопоставляется с результатами верификации на указанной модельной задаче.

Модель УЛР

Общий вид рабочей части устройства в исходном состоянии показан на рис. 1 [1]. В исходном состоянии внутри стального корпуса устройства находится рыхлая структура из жертвенного материала, имеющая высокую полную теплоёмкость и большую поверхность. Поступающий в результате аварии из разрушенного реактора расплав растворяет жертвенный материал, охлаждаясь сам, в результате чего внутри корпуса образуется бассейн расплава, расслоённый на оксидную и металлическую фазы при температуре, установившейся в пределах 2000–2200 К.

Расчётная область, моделирующая корпус с жертвенным материалом и защитами, показана на рис. 2. Моделируются в последовательности основные события при работе УЛР: поступление расплава и его эволюция, граничный теплообмен и другие.

Граничные и начальные условия в модельном расчёте УЛР:

– Водоохлаждение на наружной границе корпуса учитывалось граничным условием 3-го рода.

– На верхней границе расплава задавался теплообмен излучением с полостью над ним.

– Исходная температура – 300 К. В начальный момент времени из корпуса реактора начинает поступать расплав активной зоны, тепловыделение в котором составляло 20,4 МВт.

В модельной постановке рассчитывается только теплообмен в верхнем оксидном слое, который моделируется цилиндром, с теми же свойствами и граничными условиями вверху и сбоку.

Теплопередача в оксидном слое в УЛР и теплообмен расплава в УЛР

Для верификации модели теплообмена расплава в УЛР, ввиду отсутствия экспериментов с данными исходными условиями, использовалась аналитическая модель и корреляция для потока тепла в расплаве, приведённые в работах [2, 3]. В расчёте теплообмена в оксидном слое учитывалась структура конвективного течения, состоящего из турбулентного ядра с высокой теплопередачей и пограничных слоёв, определяющих теплообмен на границе. Пограничные слои моделировались на верхней границе тонким слоем ячеек с эффективной теплопроводностью, моделирующей оцененное вертикальное число Нуссельта величиной $Nu_{up} \sim 200$, на боковой границе – конвективным граничным условием с коэффициентом теплообмена, определяемым исходя из величины числа Нуссельта для горизонтального направления.

На рис. 3 приведено сравнение по плотности потока тепла на боковой границе цилиндра в зависимости от аспектного отношения h/R, где h – высота, R – радиус цилиндра.

В расчёте всего УЛР параметры оксидного слоя расплава соответствовали тем, что взяты в модельной задаче. Сравнивался поток тепла на стенку, полученный в модельном расчете и реалистическом. Результаты вполне удовлетворительны. На рис. 3 полученная плотность потока тепла на боковую стенку отмечена звездочкой.

Заключение

В численном расчёте получено приемлемое согласие двумерного расчёта теплообмена в оксидном слое расплава с аналитической моделью теплообмена в оксидном слое. Расчёт по полной модели показал, что поток тепла из оксидного расплава в систему охлаждения согласуется с тем, что получается в аналитических оценках. Это свидетельствует о непротиворечивости подхода к моделированию теплообмена в УЛР, принятого в настоящий момент в коде HEFEST [4].



Рис. 3. Зависимость плотности теплового потока на боковой стенке от аспектного соотношения для оксидного слоя расплава

PTTD 0

Литература

1. Сидоров А.С. Устройство локализации расплава для АЭС с ВВЭР-1200 // 7-я МНТК «Обеспечение безопасности АЭС с ВВЭР», Подольск, РФ, 17–20 мая 2011 г.

- Валетов Д.К., Каменская Д.Д. Аналитические и численные оценки теплоотдачи цилиндрических бассейна металлического и оксидного расплава // 60-я научная конференция МФТИ, Москва, РФ, 20-23 ноября 2017.
- Filippov A.S. Numerical Simulation of Turbulent Natural Convection of Oxide Heat GeneratingMelt in a Core Catcher at NPP with VVER-1000 // Journal of Engineering Thermophysics. 2011. V. 20, N 2. P. 1–13.
- Филиппов А.С., Дробышевский Н.И., Киселёв А.Е., Стрижов В.Ф., Фокин А.Л. СОКРАТ/НЕFEST: модели взаимодействия расплава активной зоны ВВЭР с конструкциями реактора при тяжёлой аварии // Известия РАН, Энергетика. 2010. 3. С. 4–24.

УДК 621.039

Неклассические режимы переноса примеси во фрактальных средах в присутствии деградирующего диффузионного барьера

П.С. Кондратенко, К.В. Леонов

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Исследовано поведение концентрации примеси в случайно-неоднородной фрактальной среде при условии размещения источника в диффузионном барьере, обладающем сферической симметрией и коэффициентом диффузии, зависящим от времени.

На рис. 1 схематически изображена пространственная область, по которой происходит перенос примеси. Внутри барьера (ближняя зона) перенос происходит в режиме классической диффузии со следующими начальным и граничным условиями:

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = D(t)\Delta c, \\ c(\mathbf{r},t)\big|_{t=0} = N_0 \delta(\mathbf{r}), \\ c(\mathbf{r},t)\big|_{r=R} = 0, \end{cases}$$
(1)

где N_0 – число частиц примеси при t = 0.

В работе были рассмотрены быстрый (экспоненциальный) и медленный (степенной) сценарии деградации барьера, которые соответственно определяются зависимостью коэффициента диффузии D = D(t) от времени:

$$D(t) = D_0 \left[1 + \exp\left(\frac{t - t_*}{t_d}\right) \right],\tag{2}$$

$$D(t) = D_0 \left[1 + \left(\frac{t}{t_*} \right)^{\alpha} \right], \qquad (3)$$
$$t_d \ll t_*.$$

Здесь $\alpha > 0$, t_* – характерное время начала процесса деградации, t_d – характерная продолжительность быстрой деградации, D_0 – коэффициент диффузии в случае стационарного барьера [1].

Внебарьерная область (дальняя зона) представляет собой неупорядоченную систему трещин с фрактальной геометрией. Здесь главным механизмом переноса является адвекция и для ее описания была использована модель случайной адвекции [2, 3], в которой корреляторы флуктуаций скорости убывают с расстоянием степенным образом.

Концентрация частиц в дальней зоне удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{v}c) = Q(t)\delta(\mathbf{r}).$$
(4)

Здесь Q(t) – эффективная мощность источника, $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ – скорость адвекции, являющаяся случайной (независящей от времени) функцией координат с нулевым средним значением: $\langle \mathbf{v}(\mathbf{r}) \rangle = 0$. Символ $\langle ... \rangle$ обозначает усреднение по ансамблю реализаций. Считаем, что граница между зонами соответствует сфере радиуса *R*.

В качестве характеристик режимов переноса задачи с барьером удобно выбрать полное число частиц примеси в дальней зоне (активных частиц):

$$N(t) = \int d^3 \mathbf{r} \left\langle c(\mathbf{r}, t) \right\rangle, \tag{5}$$

размер R(t) основной области локализации

$$R^{2}(t) = N^{-1}(t) \int d^{3}\mathbf{r} \langle c(\mathbf{r}, t) \rangle \mathbf{r}^{2}, \qquad (6)$$

асимптотику концентрации на далеких расстояниях от источника:

$$\langle c(\mathbf{r},t) \rangle \propto \exp[-\Phi(r,t)], \ r \gg R(t).$$
 (7)

В результате решения системы (1) и уравнения (4) были получены следующие режимы переноса для случая быстрой и медленной деградации барьера (рис. 2). При быстром (экспоненциальном) разрушении интервал времени разрушения $t_* < t < t_0$ оказывается очень узким, и с ростом времени режим переноса, имеющим место при $t < t_*$, практически скачкообразно переходит в режим, свойственный безбарьерному прототипу (в задаче без барьера). При медленном (степенном) разрушении барьера интервал $t_* < t < t_0$ оказывается продолжительным и здесь устанавливается режим переноса, медленный в сравнении с безбарьерным прототипом, но более быстрый в сравнении со случаем стационарного барьера.



Рис. 1. Геометрия задачи. S – источник примеси, N – ближняя зона (барьер), F – дальняя зона


Рис. 2. Размер основной области локализации в зависимости от времени в случаях быстрой (а) и медленной (б) деградаций (схематически): 1 – стационарный барьер [1] со временем диффузии $\tilde{t}_0^{(s)} = R^2/4D_0$; 2 – барьер с быстрой деградацией, $t_* \approx t_0$; 3 – барьер с медленной деградацией,

 $t_0 \approx t_* \left[(\alpha + 1)/u_* \right]^{1/(\alpha+1)} \gg t_*$ – выход частиц из барьера; $u_* \equiv u(t_*)$, $u(t_*) = 4R^{-2} \int_{0}^{t_*} D(\tau) d\tau$; показатель

степени γ в $R_*(t)$ определяет режим переноса в задаче без барьера [4].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №15-08-05241-а).

- 1. Дворецкая О.А. Кондратенко П.С., Аномальные режимы переноса примеси в фрактальных средах в присутствии диффузионного барьера // ЖЭТФ. 2013. Т. 143. Вып. 4. С. 799–803.
- Koch D.L., Brady J.F., Anomalous diffusion in heterogeneous porous media // Phys. Fluids. 1988. V. 31. P. 965.
- 3. *Koch D.L., Brady J.F.* Anomalous diffusion due to long-range velocity fluctuations in the absence of a mean flow // Phys. Fluids. 1989. V. 1. P. 47–51.
- 4. Dykhne A.M., Dranikov I.L., Kondratenko P.S., and Matveev L.V. Anomalous diffusion in a self-similar random advection field // Phys. Rev. E. 72. 2005. 061104.

Секция электродинамики сложных систем и нанофотоники

УДК 530.145

Формирование неклассических состояний локализованных плазмонов в спазерных системах под управлением внешнего магнитного поля.

М.Ю. Губин, С.Н. Карпов, А.В. Прохоров

Владимирский государственный университет им. А. Г. и Н. Г. Столетовых

В настоящей работе рассматривается возможность управления квантовыми статистическими и корреляционными свойствами генерируемых в многочастичном спазере [1] плазмонов. Используется модель парных диполь-дипольных взаимодействий для расположенных на малом расстоянии металлических наночастиц (HH)И полупроводниковых квантовых точек (КТ) [2, 3]. На основе квантования поля НЧ и КТ осуществлен последовательный вывод расширенного гамильтониана Джейнса-Каммингса на случай нелинейных плазмон-экситонных взаимодействий, возникающих за счет двухквантовых процессов распада биэкситонных состояний [4] КТ, входящей в состав трехчастичной спазерной системы (сборки НЧ-КТ-НЧ). Нелинейный режим работы рассматриваемого устройства подразумевает значительную разность в значениях частот плазмонного резонанса в НЧ и энергии межуровневого перехода в КТ. Внешнее управление спазерной системой в таких условиях может быть осуществлено посредством локализованного магнитного поля, которое приводит к зеемановскому расщеплению и диамагнитному сдвигу энергетических уровней КТ. С учетом этого, в структуру уравнений Гейзенберга–Ланжевена введен дополнительный параметр (степень свободы), отвечающий за возможность управления квантовой кинематикой спазерной системы посредством изменения величины напряженности внешнего магнитного поля.

Найдены решения для среднего числа плазмонов и экситонов, разности населенности в КТ, которые соответствуют стационарному режиму генерации спазера. Получены функциональные зависимости для спазерной частоты и порога генерации трехчастичной нелинейной спазерной системы под управлением внешнего магнитного поля. Проведен анализ полученных стационарных решений на стабильность с их проверкой путем прямого численного моделирования исходной системы уравнений. Введен параметр кросс-корреляционной функций для плазмонов, локализованных в составе спазерной системы, и исследована его временная динамика путем понижения степени коррелятора четвертого порядка на основе теоремы Вика и его сведения к системе на билинейные величины.

Для моделирования выбраны пара сферических золотых НЧ, находящихся на характерном расстоянии r = 3 HM вдоль одной прямой от изготовленной из сульфида кадмия сферической КТ с диаметром $D_{QD} = 1,9$ нм. Рассчитанные значения частоты Раби для взаимодействующих НЧ и КТ составляют $\Omega = 2 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$, тогда как величина двухквантовой частоты Раби $\Omega^{(2)} = \frac{\Omega^2}{\delta}$ составляет $2, 6 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$. Здесь δ является отстройкой спазерной частоты от частоты межуровневого перехода в КТ и в отсутствии магнитного поля составляет $7,58 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$. При выборе величины индукции внешнего магнитного поля 5 Тл зеемановский сдвиг уровней КТ составляет $8,35 \cdot 10^{11} \text{ c}^{-1}$, что соответствует появлению дополнительной экситонной отстройки $\Delta \delta = 8 \cdot 10^{11} \text{ c}^{-1}$ и смещению частоты двухквантового перехода на величину $\delta^{(2)} = 1,5 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$. Приводимые частотные сдвиги не способны оказывать существенного влияния на динамику

одноквантовых либо каскадных переходов в системе. Однако для рассматриваемого в работе случая двухквантовых переходов изменение величины индукции внешнего магнитного поля приводит к значимым изменениям двухквантовой частоты Раби, что позволяет надеяться на возможность управления нелинейными процессами распада биэкситонных состояний КТ посредством магнитного поля.

На основе анализа кросс-корреляционной функции прогнозируется формирование перепутанных плазмонов в трехчастичной спазерной системе за счёт нелинейных процессов с биэкситонными состояниями в КТ. Предложена модель эффективного источника неклассических (в т.ч.) перепутанных плазмонов [5] для целей квантовой обработки информации в плазмонных схемах [6], реализуемых на субволновых масштабах с внешним управлением посредством магнитного поля [7].

Работа выполнена в рамках государственного задания ВлГУ 2017 г. в сфере научной деятельности.

Литература

- 1. *Stockman M.I.* The spaser as a nanoscale quantum generator and ultrafast amplifier // J. Opt. 2010. V. 12. P. 024004.
- 2. Виноградов А.П., Андрианов Е.С., Пухов А.А., Дорофеенко А.В., Лисянский А.А. Квантовая плазмоника метаматериалов: перспективы компенсации потерь при помощи спазеров // УФН. 2012. Т. 182. С. 1122.
- 3. *Андрианов Е.С., Пухов А.А., Дорофеенко А.В., Виноградов А.П., Лисянский А.А.* Теория спазера на двух квантовых точках // Квантовая электроника. 2015. Т. 45. С. 245.
- 4. Salter C. L., Stevenson R. M., Farrer I., Nicoll C. A., Ritchie D. A., and Shields A. J. An entangled-lightemitting diode // Nature. 2010. V. 465. P. 594.
- Thakkar N., Cherqui C., Masiello D.J. Quantum Beats from Entangled Localized Surface Plasmons // ACS Photonics. 2015. V. 2. P. 157.
- 6. Lemke C., Leisner T., Evlyukhin A., Radke J. W., Klick A., Fiutowski J., Kjelstrup-Hansen J., Rubahn H.G., Chichkov B. N., Reinhardt C., and Bauer M. The interplay between localized and propagating plasmonic excitations tracked in space and time // Nano Lett. 2014. V. 14. P. 2431.
- 7. Gubin M.Yu., Shesterikov A.V., Karpov S.N., Leksin A.Yu., and Prokhorov A.V. Entangled plasmon generation in nonlinear spaser system under action of external magnetic field // 2017. arXiv:1709.08548v1 [cond-mat.mes-hall]

УДК 530.145

Формирование суб-пикосекундных плазмон-поляритонных импульсов в процессе кооперативного распада экситонов квантовых точек вблизи металлической поверхности

А.В. Шестериков¹, М.Г. Гладуш², А.В. Прохоров¹

¹Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых

²Институт спектроскопии РАН

В работе обсуждается возможность формирования поверхностных плазмонполяритонных (ППП) импульсов в результате коллективных эффектов [1, 2] с экситонами возбужденных квантовых точек (КТ), расположенных в слое диэлектрика с концентрацией N вблизи металлической пластины (рис. 1а). Размер КТ выбирается из условия плазмонэкситонного резонанса (рис. 1б), а концентрация КТ – исходя из необходимости компенсации потерь на рассматриваемых масштабах. Динамика развития коллективных эффектов описывается самосогласованными уравнениями для разности населенности n_{21} ,

поляризации ρ_{21} КТ, частоты Раби Ω_0 для усредненного поля ППП:

$$\dot{\rho}_{12} = -0.5 \cdot \Gamma_{\varepsilon} \rho_{12} + \left(i \Omega_0^* + i \xi_0 u_R \rho_{12} + \xi_0 u_I \rho_{12} \right) n_{21}, \tag{1a}$$

$$\dot{n}_{21} = 2i \left(\Omega_0 \rho_{12} - \Omega_0^* \rho_{21} \right) - 4\xi_0 u_I \left| \rho_{12} \right|^2 - \Gamma_{\varepsilon} \left(1 + n_{21} \right), \tag{16}$$

$$\dot{\Omega}_0 = -i \cdot t_R^{-2} \cdot \rho_{12} - \gamma_p \Omega_0, \qquad (1B)$$

где
$$t_R = \frac{1}{g\sqrt{N_a}} = \sqrt{2\hbar\varepsilon_d\varepsilon_0 \frac{\partial S_n(\overline{\omega})}{\partial \overline{\omega}} / \left(S_n(\overline{\omega})\mu_{12}^2N\right)}$$
 определяет характерное время

установления квантовых корреляций [3] между КТ и выражается через дипольный момент межзонного перехода μ_{12} и параметр Бергмана $S_n(\bar{\omega}) = \operatorname{Re}\left(\varepsilon_d / (\varepsilon_d - \varepsilon_m(\bar{\omega}))\right)$ для границы раздела с диэлектрической проницаемостью ε_d диэлектрика и $\varepsilon_m(\bar{\omega}) = 1 - \omega_p^2 / (\bar{\omega}^2 + i\gamma_p \bar{\omega})$ металла и с учетом столкновительной частоты γ_p , а также плазмонной частоты $\bar{\omega} = \omega_p / \sqrt{2}$, где $\omega_p = \sqrt{4\pi n_m e^2 / m_0}$ – плазменная частота в металле с массой электронов m_0 , зарядом e при их концентрации n_m ; $g = \Omega_0 / \varepsilon$ – константа связи, а $\varepsilon = \sqrt{N_p}$, где N_p – количество ППП в объеме V. Параметр Γ_{ε} в (1а) и (1б) задает скорость потерь для КТ, а $\xi_0 = N\mu_{12}^2 / 3\hbar\varepsilon_0$ связан с учетом локального поля диэлектрика. Особенность уравнений (1) заключается в наличии дисперсионной u_R и диссипативной u_l поправок на случай размещения плотного ансамбля КТ в диэлектрике с комплексным показателем преломления $n = n_R + in_l$.

В ходе выполненного моделирования проведено сравнение различных режимов формирования ППП импульсов на границе золото/диэлектрик, когда в качестве накачки используются сферические квантовые точки на основе полупроводникового материала CdS (KT CdS, puc. 1в). При выборе реальных, взятых из экспериментальных работ, значений скоростей релаксации для КТ и ППП, но пренебрегая пространственными эффектами распространения, показано, что коллективные эффекты развиваются на существенно более коротких временах по сравнению со временем затухания ППП, что приводит к формированию суб-пикосекундных ППП. Используя приближение среднего поля и полагая $t_R \ll 1/\gamma_p$, а также при учете локального поля для плотного ансамбля КТ в диэлектрическом окружении, самосогласованная задача сведена к уравнению нелинейного маятника с дополнительным слагаемым, ответственным за когерентный обмен энергией между формируемым импульсом и КТ в среде-носителе [2]:

$$\ddot{\theta} - \frac{\xi_0 u_I}{\Lambda} \cos(\theta) \cdot \dot{\theta} = \sin(\theta), \qquad (2)$$

где θ определяют амплитуду и угол, т.н. вектора Блоха с координатами $n_{21} = \cos(\theta)$ и $\rho_{12} = \sin(\theta)$. Решение уравнения (2) определяет профиль генерируемых импульсов, форма которых полностью совпадает с результатами численного моделирования исходной самосогласованной системы (1).

Также проведено численное моделирование распространения ППП импульсов в модели протяженной среды – одномерного планарного волновода на основе металла и диэлектрика с размещенными в слое диэлектрика КТ. Показано, что при переходе к пространственной модели распределённого спазера и сохранении прочих параметров моделирования наблюдается существенное увеличение (порядка нс) длительности плазмонных импульсов, а также значительная модификация их спектра. В частности, учет нелинейно-дисперсионных поправок локального поля в уравнениях на поляризацию среды приводит к значительному уширению и формированию практически прямоугольного спектра ППП.



Рис. 1. (а) Схема формирования ППП импульсов в плазмонном волноводе с накачкой КТ CdS [1]; (б) зависимость энергии межзонного перехода от размера КТ CdS; (в) профили интенсивности плазмон-поляритонных импульсов при $N = 2.83 \cdot 10^{22} \,\mathrm{m}^{-3}$ для КТ с размером $D_{QD} = 1.56 \,\mathrm{mm}$ вблизи золотой поверхности для $\Gamma_{\varepsilon} = 6.3 \cdot 10^{11} \mathrm{c}^{-1}$ (штриховая линия) и $\Gamma_{\varepsilon} = 0 \,\mathrm{c}^{-1}$ выбором диэлектрика (сплошная линия) скоростей затухания в КТ. Параметры взаимодействия: $u_I = -0.1582$,

 $\gamma_p = 4.1 \cdot 10^{13} \,\mathrm{c}^{-1}, \ g = 1.14 \cdot 10^{12} \,\mathrm{c}^{-1}, \ \xi_0 = 2.5 \cdot 10^{10} \,\mathrm{c}^{-1}.$

Работа выполнена в рамках государственного задания ВлГУ 2017 г. в сфере научной деятельности и гранта РФФИ 17-42-330029.

- 1. Dorofeenko A.V., Zyablovsky A.A., Vinogradov A.P., Andrianov, E.S., Pukhov A.A., Lisyansky A.A. Steady state superradiance of a 2D-spaser array // Optics Express. 2012. V. 21. P. 14539.
- 2. Shesterikov A.V., Gubin M.Yu., Gladush M.G., Prokhorov A.V. Formation of plasmon pulses in the cooperative decay of excitons of quantum dots near a metal surface // JETP. 2017. V. 124. P. 18.
- Benedict M.G., Trifonov E.D. Coherent Reflection as Superradiation from the Boundary of a Resonant Medium // Phys. Rev. A. 1998. V. 38. P. 2854.

Особенности синтеза тонких плёнок VO₂ для электродинамических приложений

В.И. Полозов^{1,2}, С.С. Маклаков¹, С.А. Маклаков¹, В.А. Амеличев³, А.Д. Мишин¹, С.Н. Старостенко¹, В.Н. Кисель¹

¹Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН ²Московский физико-технический институт (государственный университет) ³ЗАО «СуперОкс»

Тонкие плёнки диоксида ванадия испытывают резкий переход полупроводникметалл при 67 °С. Эпитаксиальный процесс позволяет получать плёнки с наибольшим размером кристаллитов и наименьшим объёмом межкристаллитного пространства, вследствие чего сопротивление таких плёнок при переходе изменяется на четыре порядка, а коэффициент пропускания СВЧ-излучения – на 18 дБ. Существует необходимость в разработке более простого метода синтеза таких плёнок, чем эпитаксиальный процесс.

Для получения плёнок VO₂ использован двухстадийный метод: реактивное BЧ магнетронное распыление V с осаждением на поликристаллическую Al_2O_3 подложку и последующим отжигом. Оптимизация реактивного процесса проводилась путем изменения парциального давления кислорода в газовой смеси, температуры и электрического смещения на подложке. Толщина плёнок ~ 110 нм; наилучшее полученное отношение сопротивлений в полупроводниковом и металлическом состояниях Rs/Rm = 3,43; размер кристаллитов менее 10 нм.

Отжиг проводили в токе аргона с нагревом до 720 °С. При оптимизации условий отжига варьировали количество циклов, максимальную и минимальную температуру выдержки, чистоту Ar. Цель исследования заключалась в проверке гипотезы о том, что многократное пересечение перитектической изотермы $V_6O_{13} \leftrightarrow VO_2$ +L (температура) приводит одновременно к росту кристаллитов VO₂, достигающих размера ~ 200 нм, и увеличению их количества за счёт переокисленного межкристаллитного пространства. Наилучшее полученное значение отношения сопротивлений в металлическом и полупроводниковом состояниях Rs/Rm = 1540 при ширине перехода 10 °С после 1 часа выдержки. Результаты оптимизации условий отжига показывают, что наравне с указанным термодинамическим фактором, следует учитывать кинетический фактор рассматриваемого высокотемпературного процесса.

Дополнительно было проведено измерение температурной зависимости коэффициента пропускания полученными образцами СВЧ излучения частотой 6–20 ГГц. Оно выполнено на составном образце, сформированном из нескольких пластин VO₂, показавших наилучшие значения *Rs/Rm*. Измерение частотной зависимости коэффициента пропускания образца проводили квазиоптическим методом в диапазоне температур 20–80 °C с использованием печи с радиопрозрачными окнами. Коэффициент пропускания образца при переходе в «металлическое» состояние уменьшается на 0,5–1 дБ по сравнению с «полупроводниковым». При переходе образец демонстрирует гистерезис, как и в случае контактного электростатического измерения сопротивления.

С помощью отжига можно получить плёнки VO₂ с высоким контрастом сопротивлений из плёнок реактивных оксидов ванадия с недостатком по кислороду. Данный метод позволяет применять поликристаллические подложки вместо эпитаксиальных и не требует вакуумной техники при отжиге. Дальнейшая работа будет заключаться в изучении влияния параметров отжига и ВЧ магнетронного распыления на характеристики синтезируемых плёнок.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект №16-33-01089).

УДК 54.03,537.3

Электрофизические характеристики фотоактивных тонкоплёночных композитов на основе октафенил-2,3-нафталоцианината цинка

К.А. Талалаев¹, Б.Д. Тонанайский¹, Е.Ф. Петрусевич³, С.С. Маклаков², Т.В. Дубинина^{3,4}, В.И. Полозов¹, М.В. Седова²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН ³Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова ⁴Институт физиологически активных веществ РАН

Материалы для органической электроники привлекают всё больше внимания, поскольку позволяют получать микроэлектронные компоненты при помощи методов жидкофазного нанесения, не требующих создания вакуума. Такими материалами часто служат композиты или гибриды электропроводящих полимеров с фотоактивными включениями. Фталоцианиновые красители являются фотоактивным компонентом, который, в зависимости от структуры молекулы, может выступать электроноакцепторным или электронодонорным компонентом, что влияет на принцип функционирования гибрида. В общем случае такой гибрид изменяет электрическое сопротивление под действием света. При подборе электродов и создании несимметрии в энергетических уровнях электродов – анода и катода этот гибрид выполняет функцию объёмного гетеропереходного слоя, и вся система в целом является органической фотовольтаической ячейкой.

Настоящая работа посвящена исследованию гетеропереходных слоёв, полученных с использованием замещённого полифениленвинилена и октафенил-2,3-нафталоцианината цинка. Фталоцианин в такой системе выполняет роль фотоактивного источника носителей зарядов. Полимер образует проводящую матрицу, обладающую преимущественно электронной проводимостью.

Для исследования роли красителя в данной системе приготавливали два композита с различной матрицей: MEH-PPV и (DEC)2PPV. Полимеры отличаются заместителями и обладают разной средней молекулярной массой и растворимостью в органических растворителях. Композит на основе MEH-PPV получали из раствора в толуоле. Композит на основе (DEC)2PPV получали из горячего раствора в о-дихлорбензоле. Плёнки получали при помощи метода spin-coating. В качестве подложки использовали ситалл с заранее изготовленными встречно-штыревыми электродами с расстоянием 100 мкм. Толщина плёнок составила ~ 30–100 нм. Фотоактивность композитов определяли по отношению темнового сопротивления и сопротивления, измеренного при освещении. Для измерения электрических характеристик использовали потенциостат/гальваностат Solartron 1287, для освещения применяли светодиодный (~ 550 нм) источник низкой мощности с автономным аккумуляторным питанием для устранения электрических наводок.

Композиты с МЕН-РРV обладают сопротивлением $1,4 \cdot 10^{10}$ Ом·см. При освещении сопротивление падает в шесть раз. Время отклика композита на освещение составляет 1,1 секунды. Композиты на основе (DEC)2PPV обладают сопротивлением $4,0 \cdot 10^8$ Ом·см. При освещении сопротивление падает в два раза. Время отклика композита на освещение составляет 0,6 секунды. В обоих случаях плёнки представляют собой композит с размерами включений красителя порядка 1 мкм. Плёнки на основе МЕН-РРV демонстрируют часть одной полуокружности на годографе импеданса, что соответствует RC контуру. При освещении изменяется сопротивление резистивного элемента ($R = 7,2 \cdot 10^8$ Ом изменяется до $R = 2,2 \cdot 10^9$ Ом) и не изменяется ёмкость конденсатора ($C = 2,7 \cdot 10^{-11}$ Ф). Эта величина называется химической ёмкостью и отражает потенциальный барьер на границе фталоцианин-полимер. Сравнение с результатами, полученными ранее [1], показывает, что химическая ёмкость не существенно зависит от молекулярной структуры фталоцианина. Импеданс композита на основе (DEC)2PPV не измеряется из-за низкой электропроводности ($\sigma \sim 7 \cdot 10^{-12}$ С).

Сравнение полученных данных с результатами, полученными для композита МЕН-PPV-субфталоцианин [1], показывает, что фотоактивность получаемых гибридов в первую очередь определяется морфологией плёнки, которая зависит от агрегации красителя в насыщенном растворе.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты №16-33-01089, 16-33-60005 и 16-01-00961).

Литература

1. Maklakov S.S., Dubinina T.V., Osipova M.M., Petrusevich E.F., Mishin A.D., Tomilova L.G. A novel hybrid blend based on phenoxy-substituted boron subphthalocyanine for organic photodetectors // J. Porphyrins and Phthalocyanines. 2016. 20. 1134–1141.

УДК 621.396

Подавление обратного рассеяния от металлического треугольника над зеркалом путём нанесения поглощающего покрытия вдоль краёв треугольника

M.Л. Oбухов¹, A.М. Лебедев²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Металлический треугольник с размерами много больше длины волны – один из основных объектов, понимание закономерностей обратного рассеяния которыми является необходимым для интерпретации диаграмм рассеяния более сложных объектов. Рассматриваются два случая: треугольник в свободном пространстве и треугольник над зеркалом (над подстилающей поверхностью в виде бесконечного металлического листа).

Второй случай удобно анализировать на эквивалентной модели зеркально удвоенного рассеивателя в свободном пространстве при его облучении как реальной, так и зеркальной к ней падающей волной. Действительно, с направления облучения рассеиватель над зеркалом видится удвоенным, но и рассеиватель видит два зеркальных облучателя. Отсюда итоговое обратное рассеяние формируется как интерференция двух полей: поля обратного рассеяния реальной падающей волны на удвоенном треугольнике и поля двухпозиционного рассеяния в исходном направлении обучения при падении зеркальной волны на удвоенный треугольник.

Максимум обратного рассеяния первого порядка создаётся треугольником в направлении нормали, максимумы второго порядка локализованы на трёх веерах повышенного обратного рассеяния в плоскостях, перпендикулярных сторонам треугольника [1]. Максимумы первого порядка для двухпозиционного рассеяния треугольником наблюдаются в направлениях зеркального отражения и теневом, а максимумы второго порядка принадлежат конусам дифракционных лучей, создаваемых сторонами треугольника [1, 2].

В общем случае в направлении обратного рассеяния от треугольника над зеркалом можно наблюдать любой из перечисленных выше максимумов первого и второго порядка, создаваемых реальным и зеркальным треугольниками, включая даже теневой лепесток при двухпозиционном рассеянии. Однако фактически исследования были проведены в предположении, что нормаль к поверхности треугольника отклонена вверх на некоторый угол, а диаграммы обратного рассеяния вычислялись для меньшего угла места и при вариации угла азимута. Таким образом, было исключено прохождение максимумов первого порядка, при сохранении возможности наблюдения максимумов второго порядка (исключить прохождение максимумов второго порядка наклоном поверхности невозможно).

В указанных условиях максимумы обратного рассеяния от треугольника над зеркалом наблюдаются при попадании направления облучения, во-первых, в плоскость, перпендикулярную ребру реального треугольника, когда

$$\phi = \phi_p \pm \left[90^\circ + \arcsin(\operatorname{ctg}\theta \cdot \operatorname{ctg}\theta_p)\right],\tag{1}$$

либо, во-вторых, в плоскость, перпендикулярную ребру зеркального треугольника при

$$\phi = \phi_p \pm \left[90^\circ - \arcsin(\operatorname{ctg}\theta \cdot \operatorname{ctg}\theta_p)\right],\tag{2}$$

либо, в-третьих, на конусы дифракционных лучей от ребра реального или зеркального треугольника при

$$\phi = \phi_n \pm 90^\circ \,. \tag{3}$$

Здесь углы θ и φ описывают направление наблюдения (и противоположное ему направление облучения), а углы θ_p и φ_p характеризуют ориентацию ребра треугольника в сферической системе координат.

Расчёты диаграмм обратного рассеяния (ДOP) проводились методом интегральных уравнений с использованием лицензированной поверхностных САПР FEKO. металлический электродинамической Был взят треугольник c горизонтальным основанием в 15 длин волн и с углами при основании 60° и 50°, а также с нормалью к поверхности, отклонённой вверх от горизонтали на 20°. Помимо рассеивателя в виде треугольника, рассматривались тот же треугольник с поглощающим покрытием, нанесённым на всю поверхность, и треугольник с покрытием, нанесённым только вдоль боковой стороны треугольника по схеме полка-скос (полке соответствует покрытие постоянной толщины, а далее толщина покрытия линейно уменьшается до нуля). Количественно обратное рассеяние характеризовалось ЭПР, вычисленной в м².

На рис. 1 приведены азимутальные ДОР треугольника на частоте 10 ГГц и при угле места 10°. Чёрной пунктирной кривой показана ДОР треугольника в свободном пространстве, серой – ДОР треугольника над зеркалом, толстой чёрной – ДОР треугольника над зеркалом при нанесении покрытия на всю поверхность треугольника, тонкой чёрной – ДОР треугольника над зеркалом при нанесении покрытия только вдоль боковой стороны треугольника.

Из рис. 1а видно, что у ДОР треугольника над зеркалом, при сохранении трёх максимумов второго порядка, характерных для треугольника в свободном пространстве, дополнительно появляются ещё по два максимума, соответствующие наклонным рёбрам, как это и следует из формул (1–3).

Нанесение РПП на всю поверхность треугольника приводит к существенному понижению уровней троек максимумов ДОР, привязанных к боковым сторонам треугольника (рис. 1б). Проведённые исследования показали, что при рациональном выборе схемы нанесения покрытия вдоль стороны треугольника, здесь это одна из его боковых сторон, снижение тройки связанных с этой стороной максимумов обратного рассеяния происходит до уровней, характерных для полностью покрытого треугольника, что подтверждает ход тонкой чёрной кривой на рис. 1б.



Рис. 1. Азимутальные диаграммы обратного рассеяния треугольника

- 1. Knott E., Shaeffer J, Tuley M. Radar cross section SciTech Publishing Inc., 2-nd edition, 2004. 637 p.
- 2. Уфимцев П.Я. Основы физической теории дифракции. М.: Бином, 2009. 287 с.

УДК 538.9

Спиновый ток в топологических изоляторах

Р.Ш. Акзянов

Московский физико-технический институт (государственный университет) Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН Всероссийский научно-исследовательский институт им. Духова

Топологические изоляторы в настоящий момент привлекают значительное внимание научного сообщества. Одним из важных свойств для приложений является возможность генерации рекордных значений спинового тока, что открывает новые возможности для спинтроники и магнитной памяти. Отличительной особенностью топологических изоляторов является наличие поверхностных металлических состояний с линейным спектром, в то время как в толще вещества материал является изолятором. Присутствие данных состояний связано с нетривиальной топологией зонной структуры в толще вещества и не зависит от свойств вещества на поверхности [1]. Поверхностные состояния топологического изолятора образуют так называемый конус Дирака, показанный на рис. 1 синим кружком, при этом спин состояний на уровне ферми жестко связан с направлением импульса. Однако, для многих материалов, таких как Bi₂Te₃ и сплавов на их основе существенно гексагональное искажение конуса при отдалении от точки Дирака [2]. Более того, гексагональное искажение влияет и на объемные состояния [3]. В данной работе изучается спиновый транспорт в топологических изоляторах для поверхностных состояний и состояний в объеме. Показано, что гексагональное искажение приводит к появлению дополнительных компонент в тензоре спиновой проводимости. Вклад в спиновый транспорт существенен как от состояний на уровне Ферми, так и от всех заполненных состояний. Спиновая проводимость имеет электрон-дырочную асимметрию. Также спиновая проводимость устойчива относительно беспорядка, что связано с доминированием линейного члена в кинетической энергии. Показано, что теория дает хорошее согласие с существующими экспериментальными данными.



Рис. 1. Конус Дирака поверхностных состояний топологического изолятора с гексагональным искажением. При малых энергиях поверхность Ферми является конусом, в то время как при больших энергиях она имеет гексагональную структуру

Литература

- 1. Hasan M., Kane C.L. Colloquium: Topological insulators // Rev. Mod. Phys. 2010. V. 82. P. 3045.
- Fu L. Hexagonal Warping Effects in the Surface States of the Topological Insulator Bi₂Te₃ // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 103. P. 266801.
- 3. *King P. D. C.* [*et al.*]. Large tunable Rashba spin splitting of a two-dimensional electron gas in Bi2Se3 // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. P. 096802.

УДК 519.254, 004.85

Анализ спектров комбинационного рассеяния белков методами машинного обучения

Б.Д. Тонанайский, И.А. Богинская, И.А. Рыжиков, И.Н. Курочкин, И.А. Родионов, А.С. Бабурин, М.В. Седова, Н.Д. Ушаков, К.А. Талалаев

Московский физико-технический институт (государственный университет) Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Разделение большого массива спектров комбинационного (КР) рассеяния белков методами параметрического анализа требует более глубокого исследования данных и большего количества времени по сравнению с методами машинного обучения, так как объекты в данном случае имеют высокую размерность и содержат схожие спектральные полосы. В связи с этим рассмотрена задача автоматического разделения спектров КР миоглобина, альбумина и серебряных подложек.

Спектры получены на спектрометре WITec на основе конфокального микроскопа при возбуждении на $\lambda = 785$ нм с использованием объектива 50х/0,9. Параметры измерений: время накопления 60 с, мощность лазера 122 мВт, усреднений 1.

В решении задачи использовали данные для альбумина, миоглобина и контрольных спектров подложек. Была проведена предварительная подготовка спектров. Базовая линия вычтена методом rubber band correction для каждого спектра. Нормировка проведена на максимальную интенсивность. Сглаживание проводилось путём выбора максимума в интервалах по восемь точек с наложением, что понизило размерность данных в четыре раза и избавило от большого числа шумовых пиков.

Классификация происходила в два этапа, на всех данных и на отфильтрованных методами обнаружения аномалий. Результат показал, что в данных присутствуют аномалии (табл. 1), обусловленные условием конкретного измерения. Отсев аномалий проводился одноклассовым методом опорных векторов (oneclass SVM). Для визуализации размерность понижалась методом T-SNE.

В качестве алгоритмов классификации испробованы метод опорных векторов (SVM), логистическая регрессия (LR), случайный лес (random forest) и градиентный бустинг (XGboost). Наилучший результат на тестовой выборке получен композицией LR и XGboost, путём добавления результатов LR в качестве дополнительного признака для Xgboost. Результаты приведены в табл. 1.

Таким образом отработана методика автоматизированной классификации спектров, включая предварительную подготовку компонент и понижение размерности. В итоге получена 99%-ная точность классификации на тестовом наборе данных из отдельного эксперимента.

Таблица 1

	Точн	юсть	Полнота		
Классификатор	До просеивания (%)	После Просеивания (%)	До просеивания (%)	После Просеивания (%)	
<u>Логистическая</u> регрессия	89	94	89	94	
Градиентный бустинг	95	99	93	99	

Результаты классификации

УДК 537.9

Рассеяние электронов на прямоугольном потенциальном барьере в нодальном полуметалле

Д.А. Хохлов^{1,2}, А.Л. Рахманов^{1,3}, А.В. Рожков^{1,3}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики имени Духова ³Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

В данной работе были вычислены коэффициенты прохождения и отражения для электронов, рассеивающихся на прямоугольном потенциальном барьере в нодальном полуметалле. Гамильтониан, описывающий электроны, дается формулой [1]:

талле. I амильтониан, описывающии электроны, дается формулой [1]:
$$\hat{H}_{\mu}(u) = \hat{H}_{\mu}(u) = \hat{H}_{\mu}(u)$$

$$H = (m - Bk_{\perp}^2)\sigma_x + k_z\sigma_z + U(\mathbf{r})\sigma_0, \qquad (1)$$

где σ_{α} – матрицы Паули, m – аналог массы покоя, $U(\mathbf{r})$ – потенциал, B – некоторый положительный коэффициент, а \hat{k}_{β} – оператор импульса по соответствующей оси. Ось z является осью анизотропии, так что необходимо отдельно рассматривать барьеры по Oz и по Oy. Спектр рассматриваемых частиц имеет следующий вид:

$$T_{e,h} = U \pm \sqrt{(m - Bk_{\perp}^2)^2 + k_z^2},$$
 (2)

здесь индексы *e*, *h* означают электронную и дырочную ветви спектра и соответствуют знакам '+' и '-' перед корнем. Для каждого направления были рассмотрены конечный и бесконечный барьеры. Во всех случаях мы находили волновую функцию до барьера, под барьером и после барьера (в случае бесконечно длинного барьера – только в двух областях). Затем осуществлялась сшивка волновой функции на границе областей по непрерывности и непрерывности производной (для барьера по *Oz* только по непрерывности). Решая систему линейных уравнений, мы получили амплитуды прошедшей и отраженной волн.

В случае барьера по Oz имеем потенциал $U(z) = U(\theta(z) - \theta(z - L))$, где $\theta(z) - \phi$ ункция Хевисайда. Для данной геометрии был обнаружен парадокс Клейна [2]. Он возникает при условии $m - Bk_{\perp}^2 = 0$. Легко заметить, что при этом гамильтониан описывает одномерные безмассовые фермионы, для которых наблюдается клейновское туннелирование.

Выпишем формулу для амплитуды отраженной волны

$$r = \sqrt{\frac{Q_{\perp}^{2} + (\mathbf{T} + k_{z})^{2}}{Q_{\perp}^{2} + (\mathbf{T} - k_{z})^{2}}} (1 - e^{2iq_{z}L}) \times \frac{(U - k_{z})^{2} - q_{z}^{2}}{[(k_{z} + q_{z})^{2} - U^{2}] - [(k_{z} - q_{z})^{2} - U^{2}]e^{2iq_{z}L}}, \quad (3)$$

где $Q_{\perp} = m - Bk_{\perp}^2$, $q_z - z$ -компонента волнового вектора под барьером, а L - длина барьера. В противоположность свободному нерелятивистскому электрону обнаружены размерные эффекты даже при т < U. Для барьера бесконечной длинны также обнаружен парадокс Клейна.

В случае барьера по *Оу* геометрия такая: $U(y) = U(\theta(y) - \theta(y - L))$ важным является, что при фиксированных т и k_z возможны два различных значения:

$$|k_{\perp}| = \sqrt{\frac{1}{B} \left(m \pm \sqrt{\mathbf{T}^2 - k_z^2} \right)}.$$
(4)

Это означает, что, упруго рассеиваясь на барьере, частица может изменить модуль волнового вектора. Данный случай решался численно для различных значений параметров. Было обнаружено полное отражение с изменением модуля волнового вектора при

 $T = k_z$. При увеличении длины барьера наблюдаются размерные эффекты и в случае T < U.

Как и в случае барьера по Oz, это происходит, потому что, выражая волновой вектор под барьером из формулы (2), мы можем получить вещественное значение и для малых энергий. Соответственно, затухания не произойдет.



Рис. 4. Зависимость коэффициента прохождения от k_{\perp} . Максимумы на графике при $k_{\perp} = 1$ соответствуют клейновскому туннелированию. Единичная вероятность туннелирования при других k_{\perp} и т = 0,5 обусловлена размерными эффектами. Параметры следующие: m = B = U = 1; L = 5



Рис. 2. На этих рисунках изображены коэффициенты прохождения и отражения *T* и *R*. Знаки '+ ' и '−' в индексах означают больший и меньший | k_⊥ | соответственно. Модуль волнового вектора в падающей волне считался большим из двух возможных. Графики строились при следующий значениях параметров: *m* = *B* = *U* = 1; k_z = 0, 3; *L* = 5

- 1. Yan Zhongbo, Peng-Wei Huang, Zhong Wang Collective modes in nodal line semimetals // Physical Review B. 2016. V. 93. P. 085138.
- Katsnelson M. I., Novoselov K. S., Geim A. K. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene // Nature Physics. 2006. V. 2. P. 620.

УДК 537.9

Влияние беспорядка на температуру Нееля ВаFe₂As₂ легированного Ru: теоретический анализ

С.В. Коканова¹, А.В. Рожков^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Многие экспериментальные системы хорошо описываются трансляционноинвариантными моделями. Однако с момента открытия купратных высокотемпературных сверхпроводников стали вызывать интерес также пространственно-неоднородные состояния. Особое значение имеет взаимодействие между неоднородностями и переходами в упорядоченные фазы. Настоящая работа посвящена теоретическому анализу данных ЯМР, приведенных в работе [1], которая изучала такое взаимодействие для Ruдопированного BaFe₂As₂. Соединение BaFe₂As₂, демонстрируя сверхпроводимость при подходящем легировании, испытывает переход в состояние волны спиновой плотности (ВСП), если легирование слабо или отсутствует (рис. 1). Физические свойства соединения

(всп), если легирование слабо или отсутствует (рис. 1). Физические своиства соединения значительно зависят от неоднородностей, внесенных примесями. Например, наблюдалось неоднородное распределение параметра порядка в фазе ВСП [2]. Несмотря на это, имеющиеся данные позволяют нам утверждать, что термодинамически определенная температура Нееля T_N довольно нечувствительна к беспорядку, введенному неоднородным распределением допантов.

В данной работе мы находим поправку к температуре Нееля, вызванную пространственными неоднородностями. Для этого с помощью теории Ландау фазовых переходов второго рода было выведено уравнение, с помощью которого можно найти поправку к температуре Нееля:

$$-\left[\xi^{2}\left(\nabla_{x}^{2}+\nabla_{y}^{2}\right)+\xi_{z}^{2}\nabla_{z}^{2}\right]S+t(\mathbf{r})S=t^{*}S,$$
(1)

где S – параметр порядка, $t(\mathbf{r})$ – локальная температура Нееля, t^* – температура Нееля образца, ξ и ξ_z – длины когерентности соответственно в плоскости Oxy и вдоль оси z. Для того чтобы учесть квазидвумерную анизотропию, присутствующую в пнитидах, коэффициенты ξ и ξ_z должны удовлетворять следующему условию: $\xi >> \xi_z$.

Для того чтобы найти поправку к температуре Нееля, мы применили теорию возмущения. Во втором порядке теории возмущения была найдена поправка к температуре, вызванная пространственными неоднородностями:

$$t^{*(2)} = \frac{1}{V} \iint t(\mathbf{r}) t(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}') d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}', \qquad (2)$$

где $G(\mathbf{r'}-\mathbf{r'})$ – функция Грина оператора – $\left[\xi^2\left(\nabla_x^2+\nabla_y^2\right)+\xi_z^2\nabla_z^2\right]$.

Далее мы усреднили поправку к температуре перехода по беспорядку, полагая, что корреляционная функция имеет следующий вид:

$$\langle t(\mathbf{r})t(\mathbf{r}) \rangle = T(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

$$T(\mathbf{r}) = \langle \Delta t^2 \rangle \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2x_0^2}\right) \delta\left(\frac{z}{d}\right),$$

$$(3)$$

где $<\Delta t^2 > -$ дисперсия локальной температуры Нееля.

Теперь учтем фазовую диаграмму $BaFe_2As_2$ (рис. 1) и то, что экспериментальные данные говорят о том, что оптимальным усреднением является усреднение по 4×4 местам посадки Fe/Ru. Можно привести зависимость поправки к температуре Нееля от уровня допирования:

$$< t^{*(2)} > \approx \frac{< n > (16 - < n >)}{100(7 - < n >)^2},$$
(4)

где < n > - среднее количество примесей в ячейке 4×4 (рис. 2). Формула (4) иллюстрирует малость поправки, вызванной пространственными неоднородностями. Даже в области сосуществования ВСП и сверхпроводящей фазы данная поправка составляет не более 6%. Это означает, что T_N может быть достаточно точно рассчитана с использованием моделей, не учитывающих пространственную неоднородность образца.



Рис. 1. Фазовая диаграмма для BaFe₂As₂. Слева выделена область, в которой низкотемпературная фаза антиферромагнитная, а справа – область со сверхпроводимостью



Рис. 2. Случайное распределение Ru (черные точки) в слое Fe (показана только часть размером 25×25 этого слоя); *N*×*N* усреднение слоя (а) приводит к (b) для *N* = 4 и (c) для *N* = 20. *N* — количество элементарных ячеек, служащих посадочными местами атомов Fe/Ru

- 1. Laplace Y., Bobroff J., Brouet V., Collin G., Rullier-Albenque F., Colson D., Forget A. Nanoscale textured superconductivity in Ru-substituted BaFe₂As₂ // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. P. 020510(R).
- Larkin A., Ovchinnikov Y. Influence of inhomogeneities on superconductor properties // Sov. Phys. JETP. 1971. V. 34. P. 651.

УДК 535.36

Особенности некогерентного рассеяния на случайных неоднородностях в слоистой системе

Р.С. Пузько

Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН Московский физико-технический институт (государственный университет)

Развитие электродинамики неразрывно связано с возможностями технологий создания микро- и наноструктурированных объектов. Одним из таких объектов, давний интерес исследователей, является вызывающих композитная среда, представляющая собой включения из одного материала в диэлектрической матрице другого. При рассеянии на случайных неоднородностях слоистой системы возникает некогерентная часть излучения [1]. Эта часть, с одной стороны, негативно отражается на добротности слоистых резонаторов (в частности, снижая чувствительность слоистых сенсоров), а с другой стороны, несет в себе информацию о самой слоистой системе. Поэтому изучение некогерентной части рассеянного излучения интересно с точки зрения определения микроструктуры композитной среды.

В данной работе было исследовано некогерентное рассеяние электромагнитной волны на случайных включениях в слоистой системе. В качестве включений были рассмотрены неоднородности, имеющие малый размер по сравнению с длиной волны. В длинноволновом приближении можно рассматривать отклик частицы как излучение диполя, с дипольным моментом, зависящим от формы и размеров случайных включений [2]. В работе были рассмотрены как включения в объеме слоистой системы, так и включения, моделирующие шероховатости на границе слоя. В работе предполагалась маленькая плотность неоднородностей, когда эффективный радиус рассеяния на неоднородности значительно меньше среднего расстояния между неоднородностями. Данное приближение позволяет пренебречь переотражением рассеянного излучения между включениями.

Рассмотрено рассеяние плоской электромагнитной волны на объемных неоднородностях диэлектрического слоя, расположенного на металлической подложке. Показано, что в диаграмме рассеяния возникают максимумы, соответствующие собственным модам системы. При этом ширина максимумов определяется добротностью этих мод. Примечательно, что интегральное рассеяние значительно возрастает при возбуждении рассеиваемой волной излучательных мод системы (мод Фабри–Перо резонатора) [3]. Для учета перехода излучения из когерентной в некогерентную составляющую предложено вводить эффективное поглощение, определяемое концентрацией и сечением рассеяния на неоднородностях.

Также рассмотрено некогерентное рассеяние на поверхностных неоднородностях (шероховатостях) слоистых систем. Шероховатости поверхности моделировались с помощью дипольных включений. Среди слоистых систем были рассмотрены фотонный кристалл и система Кречмана для возбуждения поверхностного плазмона [4]. Эти системы поддерживают высокодобротные моды, что проявляется и в спектре некогерентного рассеяния.

- 1. Sheng P. Introduction to wave scattering, localization, and mesoscopic phenomena. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006. 333 p.
- 2. Ландау Л.Д. и Лифииц Е.М. Теоретическая физика. Т. 8. Электродинамика сплошных сред. М.: Физматлит, 2005. 656 с.
- 3. Барыбин А.А. Электродинамика волноведущих структур. М.: Физматлит, 2007. 512 с.
- Kretschmann E. Die bestimmung optischer konstanten von metallen durch anregung von oberflächenplasmaschwingungen. // Zeitschrift fur Physik A Hadrons and Nuclei. 1971. N 241(4). P. 313–324.

Школа-семинар «Фундаментальные взаимодействия

и космология»

УДК 539.142.2

Исследование резонансных и слабосвязанных состояний легких ядер с однонуклонным гало на базе первопринципов

Д.М. Родкин^{1,2}, Ю.М. Чувильский^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова

Оболочечная модель ядра является одним из наиболее распространенных подходов, используемых для аккуратного описания свойств атомных ядер. Данная модель является полностью микроскопической и обладает большой предсказательной силой при описании ядерных спектров [1]. Различные версии ab initio оболочек без инертного кора (МОБИК), использующие реалистические NN- и 3N-силы, занимают значительное место в расчетах структуры ядер [2]. Типичный базис этой модели содержит на равных правах все возможные нуклонные конфигурации вплоть до уровня обрезания. В то же время хорошо известные свойства ядер демонстрируют «неравноправие» различных нуклонных конфигураций. Поэтому методы, дискриминирующие несущественные компоненты и, тем самым, позволяющие внедрить в базис дополнительные важные компоненты, также являются весьма популярными [3–5].

Одним из главных свойств легких ядер является кластеризация, проявляющаяся в определенном расщеплении ядра на два или большее число фрагментов (кор, кластеры и слабосвязанные нуклоны). Более того, учет этого расщепления обязателен при описании каналов ядерных реакций. Расчеты свойств систем, проявляющих заметную фрагментацию, с помощью обычных оболочечных методов вызывают затруднения. Требуется слишком большой оболочечный базис.

В рамках настоящего исследования (*A* + 1)-нуклонных состояний со слабосвязанным нуклоном было осуществлено следующее:

1. Разработан подход, позволяющий строить базис антисимметризованных трансляционно-инвариантных волновых функций для произвольных двухкластерных

систем, $\Psi_A = \frac{1}{W} \hat{A} \{ \Psi_{A_1} \Psi_{A_2} \varphi_{nlm}(\vec{\rho}) \}_{JM_J}$. В качестве внутренних волновых функций

кластеров возможно использование как реалистических, так и простейших модельных функций. Не представляет проблем описание систем с тяжелыми ($A_i > 4$) и возбужденными кластерами.

2. Развит формализм и создана компьютерная программа, приспособленные для представления таких функций в виде суперпозиции обычных функций модели оболочек, что позволяет использовать реалистические нуклон-нуклонные потенциалы.

3. Развитый подход без труда обобщается на многоканальные расчеты, в которых учитываются каналы с различными возбужденными состояниями остова.

4. Ортогональность функций комбинированного базиса достигается с помощью диагонализации матрицы перекрытия.

5. В рамках использованной методики разработано ее обобщение следующего уровня – комбинированный подход, базис которого может включать в себя как трансляционно-инвариантные волновые функции предложенного базиса, так и обычные оболочечные функции – решения (A + 1)-нуклонной задачи.

В рамках данного формализма в одноканальном приближении были проведены расчеты нижнего резонансного состояния ⁵Не $J^{\pi} = 3/2^{-}$ с помощью нуклон-нуклонного

потенциала Daegeon [2] со значением осцилляторного параметра $\hbar\omega = 15 \text{ МэВ.}$ Комбинированный кластерно-оболочечный базис составлен из нижнего оболочечного решения пятинуклонной задачи с суммарным главным квантовым числом $N_{\text{max}}^{(x)}$ и кластерных состояний, остовом которых является основное состояние ядра ⁴He с суммарным главным квантовым числом $N_{\text{core}} = 2$, $J_{\text{core}} = 0$, а осцилляторная функция относительного движения нуклона и остова характеризуется максимальным главным квантовым числом n_{max} . Результаты расчета приведены в табл. 1.

В табл. 2 представлены результаты расчетов основного состояния ⁹Ве в оболочечном (вплоть до суммарного главного квантового числа $N_{\min} + N_{\rm Q}$) и в многоканальном кластерно-оболочечном базисе, состоящем из ряда нижних оболочечных решений девятинуклонной задачи с суммарным главным квантовым числом $N_{\min} + N_{\rm q}$ и кластерных состояний, остовом которых является ряд нижних состояний ядра ⁸Ве с суммарным главным квантовым числом $N_{\rm core} = 0$, а осцилляторная функция относительного движения нуклона и остова характеризуется максимальным главным квантовым числом n_{rel} .

Полученные в рамках данного формализма волновые функции нижних резонансных и основных состояний легких ядер, обладающих однонуклонным гало, в отличие от полученных с помощью стандартных оболочечных кодов, дают значительно лучшие значения асимптотических характеристик, в частности порогов различных однонуклонных каналов. Их также удобно применять для описания ядерных реакций на микроскопическом уровне.

Таблица 1

	Кластерный базис $N^{(5)}_{max} = 3$		3	$N^{(5)}_{max} = 5$		$N^{(5)}_{\rm max} = 7$		Exp.					
<i>n</i> _{max}	5	7	9	5	7	9	5	7	9	5	7	9	
E _{5He}	23.08	23.39	23.61	23.47	 23.77	23.98	-25.57	-25.75	-25.86	-26.40	-26.51	-26.57	-27.41
$E_{\rm res}$	2.134	1.824	1.604	1.714	1.444	1.234	1.65	1.47	1.36	1.82	1.71	1.65	0.89

Результаты расчета нижнего резонансного состояния ⁵Не

Таблица 2

	Обол	очечный б	базис	Кластерно-оболочечный базис				Exp.
N _Q	0	2	4	$N_Q(n_{rel})$	0(9)	2(7)	4(7)	
E _{9Be}	-37.21	-47.56	-53.51	E _{9Be}	-37.75	-47.76	-53.64	-58.16
ΔE	1.01	1.08	1.35	ΔE	1.54	1.28	1.48	1.66

Результаты расчета основного состояния ⁹Ве

- 1. *Caurier E.* [*et al.*]. The shell model as a unified view of nuclear structure // Rev. Mod. Phys. 2005. 77. 427.
- 2. Shirokov A.M. NN Interaction JISP16: Current Status and Prospect, arXiv:0912.2967v1[nucl-th].
- 3. Wildermuth K. and Tang Y. C A Unified Theory of the Nucleus. Braunschweig: Veiweg, 1977.
- 4. *Quaglioni S. and Navratil P.* Ab initio many-body calculations of nucleon-nucleus scattering // Phys. Rev. 2009. C79 044606.
- Navratil P. [et al.]. Structure of A=10–13 Nuclei with Two- Plus Three-Nucleon Interactions from Chiral Effective Field Theory // Phys. Rev. Lett. 2007. 99 042501.

Изучение отклика супермодуля PSD на тестовом протонном пучке 2-6 ГэВ/с в ЦЕРНе

Н.М. Карпушкин

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

Физическая программа эксперимента CBM (Compressed Baryonic Matter) направлена на детальное изучение фазовой диаграммы КХД в области энергий столкновений тяжелых ионов 2–11 ГэВ на нуклон в лабораторной системе. Для измерения центральности и ориентации плоскости реакции в эксперименте CBM на ускорителе FAIR (Facility for Antiproton and Ion Research) будет применяться передний адронный калориметр PSD (Projectile Spectator Detector). Супермодуль PSD состоит из девяти модулей, объединенных в массив 3 × 3. Целью данной работы было определение таких характеристик супермодуля, как линейность отклика и энергетическое разрешение супермодуля PSD. Конструктивно модуль состоит из шестидесяти чередующихся слоев сцинтилляционных и свинцовых пластин. Свет с десяти секций по шесть сцинтилляционных пластин в каждой секции транспортируется на фотодетектор S12572-010P, установленный в торце модуля, с помощью Hamamatsu MPPC переизлучающего оптоволокна.

Отклик супермодуля изучался на канале T10 PS (Proton Synchrotron). Данный канал обеспечивает пучок вторичных пионов и протонов с импульсами в интервале 2–6 ГэВ/с. Для идентификации пионов и протонов в пучке измерялось время пролета частицы между двумя черенковскими детекторами с кварцевыми радиаторами диаметром 20 и 30 мм. Один из этих детекторов был установлен непосредственно перед передней поверхностью исследуемого модуля, а второй детектор был установлен на расстоянии около 11 м от модуля калориметра. Эти же детекторы использовались для формирования триггера системы считывания сигналов с фотодетекторов супермодуля. Временное разрешение данных черенковских детекторов составляет 60 пс, что позволяет детектировать пионы и протоны во всем импульсном диапазоне. Сигналы с МРРС считывались посредством 64-канальной платы ADC64s с частотой дискретизации 62,5 МГц, произведенной AFI, ОИЯИ.

Мюонный пучок канала T10, возникающий в результате распада пионов, был использован для энергетической калибровки всех секций супермодуля. Энерговыделение мюонов в первых и в последних пяти секциях модуля одинаково (рис. 1.), что используется для идентификации мюонных событий. В веществе сцинтиллятора толщиной 24 мм (каждая секция) потери энергии мюонов составляют ~5 МэВ. Коэффициенты, полученные из мюонной калибровки, использовались для определения суммарного энерговыделения отдельно для пионов и протонов во всех секциях супермодуля.

Результаты измерения энергетического разрешения калориметра для протонов и пионов приведены на рис. 2. Стоит отметить, что энергетическое разрешение супермодуля калориметра практически одинаково для протонов и пионов с импульсами, большими 4 ГэВ/с, и дальнейшее изучение разрешения супермодуля при больших импульсах может проводиться без разделения типов частиц. Во всем диапазоне энергий с хорошей точностью наблюдается линейность отклика калориметра. Результаты измерений линейности приведены на рис. 3.



Рис. 1. Корреляция между энерговыделением в первых и последних пяти секциях центрального модуля (слева). Типичный амплитудный спектр в отдельной секции (справа)



Рис. 2. Энергетическое разрешение калориметра для протонов и пионов



Рис. 3. Линейность отклика калориметра для протонов(слева) и пионов(справа)

1. *Guber F., Selyuzhenkov I.* Technical Design Report for the CBM Projectile Spectator Detector (PSD). 2015.

Моделирование образования вторичных ядер в результате электромагнитных взаимодействий ядер свинца ²⁰⁸Pb на БАК

У.А. Дмитриева^{1,2}, И.А. Пшеничнов²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт ядерных исследований РАН

Большой адронный коллайдер (БАК) работает в Европейском центре ядерных исследований (ЦЕРН) в Женеве с 2009 года. Помимо столкновений встречных пучков протонов, на БАК изучаются взаимодействия ядер свинца 208Pb. Основное внимание уделяется адронным взаимодействиям 208Pb при прицельных параметрах b (расстояниях между центрами ядер в момент их наибольшего сближения), не превышающих сумму радиусов сталкивающихся ядер. Однако при ультрарелятивистских энергиях встречных пучков 208Pb сечение их ультрапериферических (b > R1 + R2) электромагнитных взаимодействий, приводящих к электромагнитной диссоциации (ЭД) ядер, составляет свыше 200 барн [1], что значительно больше неупругого адронного взаимодействия (~8 барн). Благодаря большому сечению ЭД этот процесс электромагнитной фрагментации 208Рb определяет потери ядер пучков в БАК за счет изменения отношения заряда к массе циркулирующих ядер и вносит определенный вклад в уменьшение светимости БАК. Другим электромагнитным процессом с большим сечением, который влияет на работу БАК, является рождение электрон-позитронных пар в кулоновском поле ядра с захватом электрона на атомную орбиту, но в этом процессе образуются ионы только одного вида с зарядом 81.

Превращение ядра 208Pb в ядра близких к нему элементов в результате ЭД можно сравнить с известными в ядерной физике и технике процессами трансмутации (превращения) ядер под действием выведенных из ускорителя пучков протонов или реакторных нейтронов. В результате указанных процессов на БАК меняется магнитная жесткость частиц пучка [2], которая определяется как отношение импульса р частицы к ее заряду $p/Ze = B\rho$, где ρ – радиус траектории частицы в магнитном поле В. В результате электромагнитной диссоциации и захвата электрона могут образовываться ядра с магнитной жесткостью $B\rho(1+\delta)$, близкой к магнитной жесткости $B\rho$ первоначальных ядер, где $\delta = \frac{Z_0}{A_0} \cdot \frac{A}{Z} - 1$, где A0, Z0 – массовое и зарядовое числа начального ядра, а A, Z – конечного. При одновременном испускании нескольких нейтронов и протонов величина магнитной жесткости остаточного ядра может оказаться близкой к таковой для первоначального ядра 208Рb. Следовательно, траектория остаточного ядра в магнитном поле ускорителя будет не сильно отличаться от траектории ядер пучка 208Рb. Ядра, образующиеся в результате трансмутации ядер пучка 208Pb, могут некоторое время циркулировать вместе с ними по траекториям, незначительно отличающимся от траектории 208Pb, а при сходе с траектории вдали от точки их образования могут попадать в конструкционные элементы БАК и приводить к их локальному нагреву. В работе [2] были получены оценки таких потерь в пучке за счет электромагнитной диссоциации с испусканием одного и двух нейтронов, а также за счет рождения электрон-позитронных пар с захватом электронов ядрами.

Модель RELDIS (Relativistic ELectromagnetic DISsociation) [3], разработанная в ИЯИ РАН в сотрудничестве с другими институтами, описывает одиночную и взаимную электромагнитную диссоциацию ядер в ультрапериферических столкновениях, включая многофотонные процессы. Данная модель реализована в виде компьютерной программы, использующей метод Монте-Карло. RELDIS вычисляет сечения образования различных вторичных ядер в результате ЭД и в настоящей работе эта модель использована для столкновений 208Pb на БАК. В табл. 1 и на рис. 1 представлены результаты вычислений для пучка 208Pb с энергией $\sqrt{\text{sNN}} = 5.02$ ТэВ и лоренц-фактором $\gamma \approx 2673$, где t1/2 – период полураспада вторичного ядра и t_{lab} = γ t_{1/2} – та же величина в лабораторной системе.

Выполненное в настоящей работе моделирование позволяет определить наиболее критичные для работы БАК вторичные ядра с наименьшими значениями δ и относительно большими сечениями их образования. К таким следует отнести прежде всего 206Tl, 205Tl и 203Hg. В настоящее время проводится анализ данных эксперимента ALICE, полученных с калориметров нулевого угла, которые позволят определить количества нуклонов, испущенных в результате ЭД, и соответственно состав вторичных ядер. Экспериментальные результаты будут сопоставлены с предсказаниями модели RELDIS.

Таблица 1

Сечения образования изотопов свинца,	таллия и ртути, предсказываемые моделью
RELDIS [3] для столкновений ядер	²⁰⁸ Рb на БАК с энергией $\sqrt{s_{NN}} = 5.02$ ТэВ

	Канал ЭД	$\mathbf{t}_{1/2}$	t _{lab}	Z/A	σ (мб)	δ
²⁰⁸ Pb				0.39423		
²⁰⁷ Pb	ln	×	∞	0.39614	101600±414	-0,00481186
²⁰⁶ Pb	2n	x	00	0.39806	20340±185	-0,00962698
²⁰⁷ T1	р	4.77 мин	8.85 дней	0.39130	2021±58	0,00748182
²⁰⁶ Tl	d	4.202 мин	7.8 дней	0.39320	516±29	0,00260785
²⁰⁶ Tl	n+p	4.202 мин	7.8 дней	0.39320	2573±66	0,00260785
²⁰⁵ T1	2n+p	œ	∞	0.39512	2567±66	-0,00226793
²⁰⁴ T1	3n+p	3.783 года	10 ⁴ лет	0.39706	2270±62	-0,00713827
²⁰⁴ Hg	2n+2p	œ	∞	0.39216	201±18	0,00527068
²⁰³ Hg	3n+2p	46.594 дней	341.2 год	0.39409	305±23	0,00033918
²⁰² Hg	4n+2p	œ	00	0.39604	382±25	-0,00460024
²⁰¹ Hg	5n+2p	œ	8	0.39801	422±27	-0,00953036



Рис. 3. Сечения образования вторичных ядер с определенным отношением заряда к массе, предсказываемые моделью RELDIS [3] для столкновений ²⁰⁸Pb на БАК с энергией √s_{NN} = 5.02 ТэВ. Пунктирной линией обозначено значение Z/A, соответствующее начальному пучку ²⁰⁸Pb

- 1. *Pshenichnov I.A.* [*et al.*], Electromagnetic and hadronic interactions of ultrarelativistic nuclei // Phys. Atom. Nucl. 2011. V. 74. P. 139–150.
- Bruce R., Gilardoni S., Jowett J. M. and Bocian D. Beam losses from ultraperipheral nuclear collisions between ²⁰⁸ Pb⁸²⁺ions in the Large Hadron Collider and their alleviation // Phys.Rev. Special Topics -Accelerators and Beams. 2011. V. 12. P. 1–17.
- 3. *Пшеничнов И.А.* Электромагнитные возбуждения и фрагментация ультрарелятивистских ядер // ЭЧАЯ. 2011. Т. 42. С. 415–475.

УДК 53.082.79

Baby MIND: последние результаты тестов на пучке в ЦЕРНе

А.В. Мефодьев^{1,2}, Ю.Г. Куденко^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт ядерных исследований РАН

T2K (Tokai-to-Kamioka) – это эксперимент в Японии с длинной базой, созданный для изучения нейтринных осцилляций [1]. В осцилляционном анализе эксперимента T2K поток нейтрино и параметры модели сечений взаимодействия в основном построены на измерениях ближнего детектора ND280. Одна из наибольших систематических ошибок связана с моделью сечений взаимодействий. Данная ошибка возникает из-за разницы между веществами мишени, на которой взаимодействует нейтрино: в ближнем детекторе это углеводород CH, а в дальнем – вода.

Для уменьшения систематических погрешностей эксперимента T2K был предложен детектор WAter-Grid-And-SCintillator (WAGASCI) [2, 3], который будет установлен в зоне ближнего детектора ND280. WAGASCI состоит из мишени, представляющей собой чередующиеся слои воды и сцинтилляционных пластин, и детекторов мюонного пробега (side MRDs и back MRD – Baby MIND). Magnetized Iron Neutrino Detector (Baby MIND) [4–7] будет использован для восстановления импульса и заряда исходящих частиц. Baby

MIND состоит из модулей намагниченного железа и сцинтилляционных модулей. Сцинтилляционные модули состоят из двух вертикальных пластин [8, 9] (16 счетчиков) и двух горизонтальных пластин (95 счетчиков). Считывание сигнала с сцинтилляционных счетчиков происходит с помощью кремниевых фотоумножителей и спектросмещающих волокон. Считывание сигналов с фотоумножителей происходит с помощью электроники FEB CITIROC, разработанной университетом Женевы.

75-тонный детектор Baby MIND с принципиально новой схемой намагничивания железных модулей был протестирован летом 2017 года на пучке протонного синхротрона в ЦЕРНе. В докладе представлены результаты, полученные в ходе сборки и тестирования данного детектора.

Литература

- 1. Abe K. [et al.]. The T2K Experiment // Nucl.Instrum.Meth. 2011. A659 (2011) P. 106–135.
- 2. *Noah E.* [*et al.*]. The WAGASCI experiment at J-PARC to measure neutrino cross-sections on water // PoS EPS-HEP2015. 2015.
- 3. Quilain B. [et al.]. The WAGASCI detector as an off-axis near detector of the T2K and Hyper-Kamiokande experiments // arXiv:1610.06367 [physics.ins-det].
- 4. Parsa S. [et al.]. Baby MIND Experiment Construction Status // arXiv:1704.08917[physics.ins-det].
- 5. *Mefodiev A.* [*et al.*]. Baby MIND: A magnetized segmented neutrino detector for the WAGASCI experiment // arXiv:1705.10406v3 [physics.ins-det].
- 6. Noah E. [et al.]. Readout scheme for the Baby MIND detector // PoS PhotoDet 2015. 2015.
- 7. *Hallsjö S-P.* [*et al.*]. Baby MIND: A magnetized spectrometer for the WAGASCI experiment // arXiv:1704.08079 [physics.ins-det].
- 8. *Mineev O.* [*et al.*]. Scintillator detectors with long WLS fibers and multi-pixel photodiodes // Journal of Instrumentation 6. 2011. P. 12004.
- 9. *Kudenko Y.* [*et al.*]. Extruded plastic counters with WLS fiber readout // Nucl. Instrum. Meth.469. 2001. P. 340.

УДК 53.088.24

Оценка фона от солнечных нейтрино для экспериментов по поиску безнейтринного двойного бета-распада в ⁷⁶Ge

Л.В. Инжечик¹, А.К. Выборов^{1,2}, Г.А. Коротеев^{1,2}, А.Н. Фазлиахметов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет) ²Институт ядерных исследований РАН

В представленной работе оцениваются сечения фоновых процессов, индуцированных солнечными нейтрино на ядрах изотопа ⁷⁶Ge. Особый интерес к ⁷⁶Ge вызван его использованием в экспериментах по поиску двойного безнейтринного бетараспада, в частности в GERDA, MAJORANA и планируемых экспериментах следующего поколения [1, 2].

Двойной безнейтринный бета-распад происходит каскадно из основного состояния ⁷⁶Ge в основное состояние ⁷⁶Se через возбужденные состояния ⁷⁶As*:

$${}^{76}\text{Ge} \rightarrow \left({}^{76}\text{As}\right)^*_{virtual} + e^- \rightarrow {}^{76}\text{Se} + 2e^- + 2\overline{\nu_e}.$$

Реакция обратного бета-распада с захватом солнечных нейтрино является неустранимым источником фона. В настоящее время существуют оценки вклада возбужденных состояний промежуточного ядра в интегральное сечение и итогового значения фона от солнечных нейтрино [3].

В данной работе оценивается число фоновых событий от солнечных нейтрино, которое оценивается на уровне 10⁻⁴ событий / (кэВ*кг*год), что близко к запланированной чувствительности будущих экспериментов. Известные оценки сечений таких процессов существенно модельно зависимы, что стимулирует дальнейшее изучение вопроса.

- Schönert S. [et al.]. The GERmanium Detector Array (Gerda) for the search of neutrinoless ββ decays of ⁷⁶Ge at LNGS // Nucl. Phys. B – Proc. Suppl. 2005. V. 145. P. 242–245.
- 2. *Phillips II D. G.* [*et al.*]. The Majorana experiment: an ultra-low background search for neutrinoless double-beta decay // J. Phys.: Conf. Ser. 2012. V. 381. 012044.
- 3. *Ejiri H., Elliot S.R.* Charged current neutrino cross section for solar neutrinos, and background to ββ(0v) experiments // Phys. Rev. C. 2014. V. 89. 055501.

УДК 543.522, 539.172.4

Возможность восстановления тепловой и эпитепловой частей спектра нейтронов фотонейтронного источника методом нейтронно-активационного анализа

А.Ф. Афонин, С.В. Зуев, Е.С. Конобеевский

Институт ядерных исследований РАН

На базе линейного ускорителя электронов в ИЯИ РАН создан и активно используется W-Be-фотонейтронный источник нейтронов ИН-ЛУЭ [1]. На источнике проводятся нейтронные исследования с использованием нейтронно-активационного анализа. Для такого анализа необходимо знать спектр нейтронов, которым облучаются образцы. Спектр нейтронов фотонейтронного источника формируется тепловыми, эпитепловыми и быстрыми нейтронами. Предполагаемая форма спектра и оценка плотности потока нейтронов были получены при помощи моделирования [2]. Так как в нейтронно-активационном анализе измеряемые величины связаны с характеристиками спектра нейтронов через интеграл свертки спектральной плотности потока нейтронов с известным сечением (n, γ) реакции, то извлечь информацию о спектре из экспериментальных данных нельзя в явном виде, а можно восстановить, например, решением обратной задачи.

В данной работе рассмотрены способы восстановления информации о форме спектра и вкладов в него нейтронов тепловых и эпитепловых энергий. Проведен сравнительный анализ сечений нейтронного захвата на различных ядрах и свертки сечений с различными энергетическими участками модельного спектра нейтронов. Отобран ряд элементов в качестве образцов для облучения нейтронами в источнике и последующего нейтронно-активационного анализа. Для этих элементов заметный вклад в измеряемые величины дают только тепловые или эпитепловые нейтроны либо их комбинации. Проведены облучения образцов и измерения активационных спектров с использованием низкофонового гамма-спектрометра [3]. Проведено восстановление формы спектра нейтронов источника в тепловой и эпитепловой части спектра. Оценены значения плотности потока нейтронов в этих областях спектра.

- 1. Andreev A.V. Burmistrov Yu.M., Zuyev S.V., Konobeevski E.S., Mordovskoy M.V., Nedorezov V.G. Possibility of Determining Microimpurities in Materials Using a Activation Measuring Complex Based on a Photoneutron Source // Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 2017. V. 81. N 6. P. 748.
- Andreev A., Burmistrov Yu., Gromov A., Ilić R., Konobeevsky E., Koptelov E., Latysheva L., Mordovskoi M., Ponomarev V., Potashev S., Rogov A., Sabinin S., Sidorkin S., Sobolevsky N., Solodukhov G., Tishin V., Zuyev S. Mathematical modeling of neutron sources on the basis of fragmentation and spallation processes and (γ,n) reactions // Fifth Int. Conf. on Nucl. Fragm. (NUFRA2015). Kemer. Oct. 2015. https://fias.uni-frankfurt.de/historical/nufra2015/talks/Sobolevsky_nufra2015.pdf.
- Andreev A.V., Burmistrov Yu.M., Zuyev S.V., Konobeevski E.S., Mordovskoy M.V., Firsov V.I. Low_Background Gamma Spectrometer with Protection on Anticoincidences from Cosmic Radiation // Nucl. Phys. and Eng. 2013. V. 4. P. 879.

УДК 530.145

Переход к нерелятивистскому пределу при распаде Q-шара на массивные фермионы

К.С. Давыдов

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

В моделях комплексного скалярного поля с потенциалом определённого вида возможно существование стабильных решений уравнений движения типа Q-шара. Естественно расширить такие модели, введя юкавский член взаимодействия скалярного поля и фермионов $\frac{g}{2}\phi\overline{\psi}^{C}\psi + \frac{g}{2}\phi^{*}\overline{\psi}\psi^{C}$. Как было показано для случая Q-шара в тонкостенном приближении [1–3], на его поверхности образуются пары безмассовых фермионов (нейтрино), и, таким образом, Q-шар испаряется.

Рассмотрим взаимодействие массивных фермионов с Q-шаром. Будем считать, что фермионы не сильно искажают поле Q-шара. В таком случае можно выбросить из лагранжиана кинетический и потенциальный члены скалярного поля, оставив только фермионную часть и член взаимодействия:

$$\mathcal{L} = i\bar{\psi}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi - m\bar{\psi}\psi + \frac{g}{2}\phi\overline{\psi}^{C}\psi + \frac{g}{2}\phi^{*}\overline{\psi}\psi^{C}, \qquad (1)$$

где индекс *c* обозначает зарядовое сопряжение, а $\phi = e^{i\omega t}\rho$. Функция ρ является сферически-симметричной, что требует разложения ψ по базису сферических спиноров. В тонкостенном приближении, когда ρ в области Q-шара является постоянной, не равной нулю, найти решение уравнений движения не представляет труда [4]. Ситуация усложняется, когда поле Q-шара меняется в зависимости от координаты. В отличие от случая безмассовых фермионов, из уравнений движения напрямую не следуют уравнения второго порядка отдельно на верхнюю и нижнюю компоненту биспинора ψ (а также на спиноры, сопряжённые им), так как из-за наличия массового члена получается четыре спинорных уравнения. Для того чтобы упростить уравнения движения, перейдём к нерелятивисткому пределу. В таком случае при медленно меняющемся поле Q-шара для фермионного решения система из четырёх уравнений сводится к решению одного уравнения второго порядка.

В ходе работы были получены уравнения движения в указанном приближении, получены условия его применимости. Получено выражение для оператора, коммутирующего с матрицей операторов, действие которой на пару биспиноров определяет уравнения движения. Собственные функции найденного оператора позволяют избавиться от временной зависимости в полевых уравнениях. Установлен физический смысл решений на пространственной бесконечности на основе сравнения с теорией с постоянным ρ . Также было получено выражение для сохраняющегося тока в теории с лагранжианом (1).

- 1. Cohen A.G., Coleman S.R., Georgi H., Manohar A. The Evaporation of Q- Balls// Nucl.Phys. B272. 1986. P. 301-321.
- 2. Clark S.S. Particle production from Q-balls // Nucl.Phys. B756. 2006. P 38-70.
- 3. *Multamaki T., Vilja I.* Analytical and numerical properties of Q balls// Nucl.Phys. B574. 2000. 130–152.
- Kawasaki M., Yamada M. Q-ball Decay Rates into Gravitinos and Quarks // Phys.Rev. D87. 2013 N 2. 023517.

УДК 539.12:524.852

Модели с фазовым переходом и со слабо взаимодействующим скалярным полем в свете разрешения некоторых проблем космологии и астрофизики

А.С. Чудайкин

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

Введение стерильных нейтрино, частиц, не взаимодействующих с калибровочными бозонами, но смешивающихся с активными нейтрино, является одним из популярных минимальных расширений Стандартной Модели физики частиц, которое способно разрешить целый ряд проблем, существующих в космологии и астрофизике на сегодняшний день. В первую очередь, речь идет о происхождении темной материи и о фотонной линии 3,5 кэВ, наблюдаемой в направлении целого ряда скоплений галактик.

Однако выясняется, что угол смешивания, не ведущий к перепроизводству темной материи из стерильных нейтрино в ранней Вселенной, оказывается чрезвычайно малой величиной для прямого обнаружения на установках «Троицк ню-масс» (ИЯИ РАН, Москва) [1] и KATRIN (Технологический институт Карлсруэ, Германия) [2]. Ряд феноменологических моделей, предлагаемых в данной работе, способен ослабить существующие ограничения из астрофизики и космологии на угол смешивания и сделать предстоящие поиски стерильных нейтрино с массой порядка единиц кэВ/с² в наземных экспериментах интересными уже сегодня.

Согласно первой модели скрытый сектор обладает нетривиальной структурой. Стерильное нейтрино здесь приобретает массу только в момент фазового перехода за счет нарушения симметрии в скрытом секторе. А это значит, что до нарушения переходы из активных нейтрино в стерильные не происходят, что обеспечивает нужное количество темной материи из стерильных нейтрино сегодня.

Во второй модели, помимо стерильных нейтрино в скрытом секторе, предполагается существование легкого слабо взаимодействующего скалярного поля, которое вносит дополнительный вклад в массу стерильных нейтрино. В начальный период эволюции скалярное поле «заморожено» и не осциллирует, а масса стерильных нейтрино принимает большое значение, что делает осцилляции кинематически невозможными. Когда Вселенная достаточно остыла, начинаются осцилляции скалярного поля. Только с этого момента возможны переходы между разными состояниями нейтрино ввиду того, что скалярное поле осциллирует с большой амплитудой и всегда будет существовать промежуток времени, в течение которого масса стерильных нейтрино опускается до приемлемого уровня. Однако ввиду малости такого временного промежутка рождение стерильных нейтрино оказывается подавленным.

В настоящей работе [3] изучены модели, в рамках которых удается эффективно подавить рождение стерильных нейтрино в осцилляциях в ранней Вселенной. В частности, получены допустимые области в пространстве параметров «угол смешивания»-«древесная масса стерильного нейтрино» в моделях с фазовым переходом в скрытом секторе и со слабо взаимодействующим скалярным полем. Также определены ограничения на массу скалярного поля и константу его взаимодействия со стерильными нейтрино в последней модели.

- 1. *Abdurashitov D.N.* [*et al.*] First measeurements in search for keV-sterile neutrino in tritium beta-decay by Troitsk nu-mass experiment // JETP Lett. 2017. V. 105. N 12. P. 753–757.
- 2. Adhikari R. [et al.] A White Paper on keV Sterile Neutrino Dark Matter // White paper. 2016.
- 3. F. Bezrukov, A. Chudaykin, D. Gorbunov Hiding an elephant: heavy sterile neutrino with large mixing angle does not contradict cosmology // JCAP. 2017. V. 1706. N 06. P. 051.

УДК: 519.25.256

Тестирование различных типов сцинтилляторов для эксперимента Enubet (CERN)

С.А. Федотов¹, К.А. Лукьянов^{1,2}

¹Институт ядерных исследований РАН

² Московский физико-технический институт (государственный университет)

Знание о начальном потоке нейтрино в нейтринных пучках представляет основное ограничение для точного (1%) измерения сечений v_e и v_{μ} . Текущий прогресс в быстрых и радиационно стойких детекторах дает беспрецедентную возможность контролировать лептоны в распадном туннеле нейтринных пучков и, следовательно, на порядок уменьшать неопределенность первичного потока. Возможности и проблемы этого нового подхода находятся в центре внимания проекта Enubet [1].

Одним из основных детекторов эксперимента Enubet является детектор позитронной идентификации [2]. Позитронная идентификация в области энергий в несколько ГэВ может быть достигнута с использованием быстрых калориметров с продольной сегментацией. Обмен заряда ограничивает возможность разделения e^+/π^+ величиной порядка 99%, а этот показатель удовлетворяют требованиям по измерению поперечного сечения. Подобные калориметры, изготовленные на основе пластикового сцинтиллятора, выбраны для использования в эксперименте Enubet, поскольку они экономически выгодны и регистрация ими заряженных частиц происходит с высокой точностью. Однако, в отличие от стандартных ускорительных экспериментов, заряженные частицы возникают здесь в любой точке распадного тунеля, а средний полярный угол зависит от начального импульса родительской частицы и кинематики трехчастичного каонного распада. Таким образом, идеальным решением является калориметр, имеющий продольную сегментацию.

В калориметрах типа «шашлык» последовательно чередуются слои поглотителя и сцинтиллятора, и эти слои перпендикулярно пронизываются спектросмещающим волокном. Прототип калориметра Enubet состоит из базовых блоков (рис. 2), которые состоят из стопки поглотителя, которые чередуются со сцинтилляционными пластинами. Каждый из блоков содержит девять спектросмещающих волокон, пронизывающих все его слои, с плотностью компоновки 1 волокно/см². Сигнал с каждого волокна считывается с помощью микропиксельного лавинного фотодиода, расположенного в задней части блока. В рамках данной работы было произведено тестирование различных типов сцинтилляционных плиток. График зависимости световыхода от общей толщины плиток сцинтиллятора в блоке для четырех различных типов сцинтилляторов приведен на рис. 3.



Рис. 1. Схематическое изображение установки эксперимента Enubet



Рис. 2. Прототип базового блока калориметра позитронной идентификации



Рис. 3. График зависимости световыхода от общей толщины сцинтилляционных плиток в базовом блоке для четырех различных типов сцинтилляторов

- 1. *Longhin*, [*et al.*] A novel technique for the measurement of the electron neutrino cross section // Eur. Phys. J. C. 2015. 75:155 arXiv: 1412.5987.
- 2. *Berra*, [*et al.*] A compact light readout system for longitudinally segmented shashlik calorimeters // arXiv: 1605.09630.

УДК 53.082.79

Эволюция поляризации электрона в лазерно-плазменном ускорителе

А.С. Костин¹, Ю.Г. Куденко^{1,2,3}

¹Институт ядерных исследований РАН

²Московский физико-технический институт (государственный университет) ³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Рассмотрена идея высокоактивного мелкозернистого детектора. Элементы детектора представляют собой $1 \times 1 \times 1$ см³ кубики из пластикового сцинтилляционного

вещества. Показания считываются с помощью спектросмещающего оптоволокна. Каждый кубик имеет три ортогональных отверстия, а протянутое через них оптоволокно позволяет выделить сигнал от каждого отдельного сегмента. Первоначальная цель разработки данного детектора – это использование его на активной нейтринной мишени для детектирования, измерения и идентификации частиц в конечном состоянии, в частности мюонов или электронов, пионов, протонов и фотонов, вплоть до низких энергий. Три считывающих выхода, а также высокая сегментация обеспечивают точное измерение координат и энергии. Это также гарантирует хорошие временное разрешение и изотропность. Продемонстрировано возможное применение предложенного детектора в апгрейде ближнего детектора T2K, приведены результаты НИОКР-теста.

Литература

- Davide S., Blondel A., Cadoux F. (Geneva U.), Fedotov S. (Moscow, INR), Korzenev A. (Geneva U.), Kudenko Y. (Moscow, INR & Moscow, MIPT & Moscow Phys. Eng. Inst.), Longhin A. (INFN, Padua), Mineev O. (Moscow, INR), Noah (Geneva U.) E., Yershov N. (Moscow, INR). A fully active fine grained detector with three readout views // e-Print: arXiv:1707.01785[physics.ins-det] Jul 6. 2017. 9 p.
- 2. *Mineev O.* [*et al.*]. Scintillator detectors with long WLS fibers and multi-pixel photodiodes // JINST 6. 2011. P12004 [arXiv:1110.2651 [physics.ins-det]].
- 3. *Kudenko Y.G.* [*et al.*]. Extruded plastic counters with WLS fiber readout, Nucl. Instru // Meth. A 469. 2001. 340.

УДК 539.171.112

Резонанс Ропера в дифракционных исследованиях в эксперименте ALICE на Большом адронном коллайдере

А.И. Шабанов

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

Исследование дифракционных процессов занимает важное место в научных программах экспериментов на Большом адронном коллайдере. До сих пор не существует теоретических методов, которые позволили бы предсказать поведение дифракционных сечений из первых принципов, а значит, единственным источником информации об этих процессах является эксперимент. Несмотря на то, что в составе установки ALICE нет детекторов типа «Римский горшок», её возможности превосходят по ряду параметров как ATLAS, так и CMS. В частности, благодаря низкому энергетическому порогу идентификации частиц центральными детекторами и особым параметрам магнитной оптики возможно исследование центральной дифракции вплоть до масс, недостижимых в других экспериментах.

Наиболее существенный вклад в систематическую ошибку измерения дифракционных сечений вносят процессы с образованием резонанса Ропера и других радиальных возбуждений протона. Основными каналами распада этих резонансов являются $N^* \rightarrow p + \pi^0$ и $N^* \rightarrow n + \pi^+$, причём протон и нейтрон могут быть зарегистрированы детектором ZDC, а заряженный пион или продукты распада нейтрального пиона – детектором AD. Таким образом, оказывается возможным определить вклад данных процессов в дифракционные сечения и оценить систематическую ошибку их измерения.

В данной работе рассматриваются результаты Монте-Карло моделирования дифракционных событий с рождением резонанса Ропера, а также эффективность его регистрации детекторами эксперимента ALICE.

Литература

1. *Khoze V.A., Martin A.D., Ryskin M.G.* Can invisible objects be «seen» via forward detectors at the LHC? // J.Phys.G. 2017. V. 44. N 5. P. 055002.

2. *Oppedisano C*. The ALICE Zero Degree Calorimeter in pp physics // Nuclear Physics B (Proceedings supplements). 2011. V. 215. N 1. P. 173–175.

УДК 539.12.01

Поляковские петли в динамике горячей КХД

Н.О. Агасян^{1,2}, М.С. Лукашов^{1,3}, Ю.А. Симонов¹

¹ Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова ² Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

³ Московский физико-технический институт (государственный университет)

Поляковские линии (ПЛ) $L_a(T)$, a = 3, 8, ..., имеют двойное значение в динамике горячей КХД. В первую очередь, они служат параметром порядка (см. обзоры [1, 2]), являясь ненулевыми выше критической температуры и указывающими на отсутствие конфайнмента. Второе, как мы отмечаем в данной работе, ПЛ имеют исключительно важное значение для динамики горячей КХД в целом. В методе полевых корреляторов (ПК) это напрямую выводится из лагранжиана КХД с учетом квадратичных глюонных ПК [3, 4].

В работах [3, 4] было показано, что свободная энергия пропорциональна L^n в мацубаровском разложении по *n*. Здесь же продемонстрировано, что эта зависимость принципиальна в определении характера всех термодинамических характеристик в интервале $T_c \leq T \leq 4 T_c$ и значима для $T \leq 10 T_c$. В частности, примечательное плато $\frac{I(T)}{T^2 T_c^2}$

для SU(3), обнаруженное в [5], объясняется поведением $T \frac{\partial}{\partial T} L_{adj}(T)$, близким к $1/T^2$ (рис.

2, верхний правый угол).

В работах [8, 9] было показано, что

$$\sqrt{\sigma_s(T)} = C_\sigma g^2(T)T, \qquad (1.1)$$

$$g^{-2}(T) = 2b_0 \ln \frac{T}{\Lambda_{\sigma}} + \frac{b_1}{b_0} \ln \left(2 \ln \frac{T}{\Lambda_{\sigma}} \right), \qquad (1.2)$$

$$b_0 = \frac{11N_c}{48\pi^2}, \ b_1 = \frac{34}{3} \left(\frac{N_c}{16\pi^2}\right)^2.$$

Для SU(3) калибровочной теории E $c_{\sigma} = 0,566 \pm 0,013, \Lambda_{\sigma} = (0,104 \pm 0,009)T_c$ [8,

9].

Использована осцилляторная фора цветомагнитного взаимодействия, которая в аналитической форме представляется следующим образом:

$$G_{3}(s) = \frac{1}{\left(4\pi s\right)^{3/2}} \frac{M_{0}^{2}}{\sinh\left(M_{0}^{2}s\right)},$$
(1.3)

где M_0 мы можем связать с массой экранировки $m_D = 2\sqrt{\sigma_s}$ [6, 7]. Итоговая формула для глюонного давления в осцилляторной форме принимает следующий вид:

$$P_{gl}^{(osc)} = \frac{2(N_c^2 - 1)}{(4\pi^2)} \sum_{n=1}^{\infty} L_8^n \int \frac{ds}{s^2} e^{-\frac{n^2}{4sT^2}} \frac{M_0^2}{\sinh\left(M_0^2 s\right)}.$$
 (1.4)

Заметим, что при ${M_0}^2 \rightarrow \infty$ мы получаем свободный случай.

Также показано, что можно использовать осцилляторную форму для воспроизведения линейного конфайнмента с достаточно хорошей точностью 5%.

Результаты численных расчетов для давления в следующих приближениях, $P_{gl}^{(0)}(T)$ (давление без магнитного конфайнмента) и $P_{gl}^{(osc)}(T)$ с $L_8(T)$ и $\sigma_s(T)$, представлены на рис. 1, сравнение приводится с решеточными данными [5]. Можно наблюдать небольшое улучшение результатов при включении в рассмотрение $\sigma_s(T)$ в $P_{gl}^{(osc)}(T)$, однако $P_{gl}^{(0)}(T)$, где участвует только $L_8(T)$, тоже дает достаточно хорошее приближение. Это подтверждает заявленное в самом начале утверждение о важности ПЛ, которые должны напрямую входить в P_{gl} , согласно нашим вычислениям.



Рис. 1. Давление $\frac{P(T)}{T^4}$ в SU(3) теории. Штриховая линия соответствует давлению без магнитного

конфайнмента; неразрывная линия соответствует конфайнменту с модифицированным осциллятором, точки отвечают решеточным данным [5]



Рис. 2. Аномалия следа тензора энергии-импульса $\frac{I(T)}{T^4}$. Обозначения аналогичны рис. 1. Рисунок

в верхнем правом углу соответствует
$$\frac{I(T)}{T^4} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2$$

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (№ 16-12-10414).

- 1. Petreczky P. Lattice QCD at non-zero temperature // J. Phys. G. 2012. V. 39. P. 093002.
- 2. Sharma S. QCD Thermodynamics on the Lattice // Adv. High Energy Phys. 2013. V. 2013. ID: 452978.
- Simonov Yu.A. Nonperturbative equation of state of quark-gluon plasma // Ann. Phys. (NY). 2008. V. 323. P. 783.
- 4. *Komarov E.V. and Simonov Yu.A.* Nonperturbative equation of state of quark-gluon plasma: Applications // Ann. Phys. (NY). 2008. V. 323. P. 1230.
- 5. Borsanyi S., Endrödi G., Fodor Z. [et al.] Precision SU(3) lattice thermodynamics for a large temperature range // J. High Energ. Phys. 2012. V. 2012. N. 07. P. 056.
- 6. *Agasian N.O. and Simonov Yu.A.* New nonperturbative approach to the Debye mass in hot QCD // Phys. Lett. B. 2006. V. 639. P. 82.
- 7. Agasian N.O. Thermal gluo-magnetic vacuum of SU(N) gauge theory // Phys. Lett. B. 2003. V. 562. P. 257.
- Karsh F., Laermann E. and Lütgemeier M. Three-dimensional SU (3) gauge theory and the spatial string tension of the (3+1)-dimensional finite temperature SU (3) gauge theory // Phys. Lett. B. 1995. V. 346. P. 94.
- 9. Boyd G., Engels J., Karsch F. et al. Thermodynamics of SU(3) lattice gauge theory // Nucl. Phys. B. 1996. V. 469. P. 419.
- 10. Agasian N.O., Lukashov M.S., Simonov Yu.A. Dynamical role of Polyakov loops in the QCD thermodynamics // Mod. Phys. Lett. A. 2016. V. 31. N. 37. P. 1650222.

Секция «ИТЭР – шаг в энергетику будущего»

УДК 621.039.634

Изготовление и испытания упрощённых квалификационных макетов панели первой стенки ИТЭР

А.А. Герваш, Д.А. Глазунов, П.Ю. Пискарёв, В.В. Рузанов

Научно-исследовательский институт электрофизической аппаратуры им. Д.В. Ефремова

В феврале 2014 года между домашним агентством РФ и МО ИТЭР подписан контракт на изготовление и поставку 179 высоконагруженных панелей первой стенки для термоядерного реактора ИТЭР. Все 179 панелей должны быть изготовлены в НИИЭФА, совместно с НИКИЭТ.

Первым этапом на пути серийного изготовления панелей является изготовление и испытание квалификационного прототипа. Основная задача на этом этапе показать, что изготовители обладают технологиями, необходимыми для создания и испытания полноразмерных панелей.

Технология изготовления высоконагруженной панели состоит из множества технологически сложных этапов, таких как сварка взрывом, сложная высокоточная фрезеровка больших компонентов на пяти координатных станках, сварка лазером швов сложной конфигурации, неразрушающий контроль сварных и паяных соединений; однако самым сложным и ответственным технологическим этапом является вакуумная пайка бериллиевой облицовки на бронзовый теплоотводящий слой элементов панели.

В данном докладе описывается процесс изготовления и испытаний квалификационного прототипа.

УДК 620.169.1

Комплексные испытания элементов конструкции панелей первых стенок и соединителей модулей бланкета ИТЭР

А.В. Чебурова, С.Э. Хомяков, В.Ю. Колганов, И.И. Поддубный, Д.А. Власов, Е.В. Паршутин, А.Ю. Лешуков, М.Н Свириденко, С.Н. Томилов, А.В. Размеров

Научно-исследовательский и конструкторский институт энерготехники им. Н.А. Доллежаля

АО «НИКИЭТ» в соответствии с соглашениями о поставках панелей первых стенок (ППС) и соединителей модулей бланкета (СМБ) является ответственным за разработку, экспериментальное обоснование и изготовление компонентов ППС и СМБ. Одним из этапов экспериментального обоснования работоспособности являются циклические механические испытания. В 2016 г. АО «НИКИЭТ» провел следующие испытания элементов системы крепления (СК) ППС и СМБ ИТЭР:

 механические циклические испытания цилиндрических накладок с уменьшенным радиусом контактных поверхностей и осевым нагружением;

 механические циклические испытания призматических накладок с уменьшенным радиусом контактных поверхностей и смещенным нагружением;

– механические циклические испытания резьбового стакана ППС с установленным центральным болтом.

Механические циклические испытания накладок СМБ проводились с целью экспериментального определения остаточных деформаций в накладках и нажимных

пластинах (имитаторах ключей вакуумной камеры) и исследования их влияния на динамические усилия в накладках при работе реактора ИТЭР. Данные работы были проведены в рамках соглашения о поставках СМБ.

Испытания резьбового стакана проводились с целью подтверждения работоспособности элементов СК ППС и определения коэффициентов запаса по нагрузке и по количеству циклов. Также в данном испытании была продемонстрирована работоспособность резьбовых соединений, выполненных методом механической обработки. По результатам испытаний целесообразно рассматривать механическую обработку в качестве базового метода для изготовления резьбы вместо накатки. Данная работа была проведена в рамках соглашения о поставках ППС.

В настоящей статье представлено описание конструкций элементов ППС и СМБ, условия и параметры испытаний, а также полученные результаты, подтверждающие работоспособность элементов СК ППС и СМБ ИТЭР.

Литература

- 1. Власов Д.А., Поддубный И.И., Хомяков С.Э., Колганов В.Ю., Жмакин А.В., Париутин Е.В. Обоснование работоспособности соединителей модулей бланкета ИТЭР // «Инновации в атомной энергетике», Конференция молодых специалистов. 2013. С. 176–185.
- 2. *Khomiakov S.* [*et al.*]. ITER blanket module connectors. Design, analysis and testing for procurement arrangement // Fusion Eng. Des. 2016. http://dx.doi.org/10.1016/j.fusengdes.2016.03.015.
- Leshukov A.Yu. [et al.]. Overview of JSC "NIKIET" activity on ITER Procurement Arrangements // Fusion Eng. Des. 2016. 109-111 (2016) 61-72.

УДК 621.039.63

Влияние сдвиговых напряжений на работоспособность плазменного покрытия Al₂O₃ опорных элементов систем крепления модулей бланкета ИТЭР

А.Н. Зайцев

Научно-исследовательский и конструкторский институт энерготехники им. Н.А. Доллежаля

Проведен анализ сложнонапряженного состояния плазменного электроизоляционного покрытия (ЭИП) – Al_2O_3 толщиной $h = 0,35_{-0,05}$ мм изделий модулей бланкета ИТЭР, возникающего при циклических сдвиговых перемещениях тяжело нагруженных узлов трения типа опор, который выявил опасность разрушения (отслоения, растрескивания, выкрашивание) ЭИП при максимально расчетных сжимающих усилиях $p_a = 0-500$ МПа – коэффициент трения $f \ge 0,28$ (рис. 1).

Предложено оценивать несущую способность плазменных ЭИП путем сопоставления эквивалентного напряжения $\sigma_{_{3KG}}$ с допускаемым касательным напряжением [τ]. Расчет эквивалентных напряжений проводился по теории Мора:

$$\tau_{c_{II}}^{F_N} > \sigma_{BC} > \sigma_{_{3KB}} = \sigma_1 - k \cdot \sigma_3, \tag{1}$$

$$\sigma_{_{\mathsf{ЭKB}}} \leq [\tau], [\tau] = \tau_{c_{\mathsf{Z}}}^{F_N} / n, \qquad (2)$$

где $k = \sigma_{_{BP}} / \sigma_{_{BC}} = 0.54[1], n = 1.2$ – коэффициент запаса.

Величина прочности сцепления на сдвиг при сжатии $\tau_{co}^{F_N}$ ЭИП определялась опытным путем на плоских образцах путем создания одновременного действия сжимающих и сдвигающих усилий на покрытие (рис. 2). Неравномерность распределения сжимающих напряжений по ширине покрытия учитывалась с помощью коэффициента K_{τ} , который определялся численным решением уравнения напряженного состояния для покрытия на плоских образцах $q_1 = F_{cd}/(al)$ [2]:
$$\tau_{cd}' = \tau_{\max} = \frac{GF_{cd}(1 + e^{-2kl})}{albEk(1 - e^{-2kl})} = K_{\tau} \frac{F_{cd}}{l^2},$$
(3)

$$K_{\tau} = \frac{Gl(1 + e^{-2kl})}{abEW(1 - e^{-2kl})} = 4,68,$$
(4)

$$\tau_{c,\mu}^{F_N} = \frac{F_{c,\mu}}{l^2} + \xi, \xi = \tau_{c,\mu}' - \tau_{c,\mu} = 55,6 \text{ MI},$$
(5)

где $\tau'_{cd} = 70,7$ МПа – с учетом неравномерности нагружения ($\tau_{cd} = F_{cd}/l^2 = 15,1$ МПа), E = 131 ГПа , G = 13,76 ГПа [1], a = 0,2 мм, b = 0,15 мм, l = 2,5 мм.

Результаты обработки экспериментальных данных прочности сцепления на сдвиг при сжатии представлены на рис. 3. При расчетах было сделано допущение, что линейная зависимость прочности сцепления ЭИП сохранится в пределах прочности покрытия при сжатии σ_{BC} .

Найденное допускаемое значение коэффициента трения [f] = 0,28 позволяет производить оценку работоспособности тяжело нагруженных узлов типа опор модулей бланкета с керамическим ЭИП при известном диапазоне изменения тангенциальных сил трения.



Рис. 1. Изменение эквивалентных напряжений σ_{экв} в зависимости от величины коэффициента трения скольжения *f* и допускаемого касательного напряжения [*τ*] пар трения ЭИП – металл модулей бланкета от контактного давления (а), типовая схема нагружения ЭИП при сдвиговых перемещениях изделий с ЭИП: 1 – ЭИП; 2 – подложка (коррозионно-стойкая сталь, бронза); 3 – ответная деталь



Рис. 2. Нагружение ЭИП при измерении прочности сцепления на сдвиг при сжатии



Рис. 3. Прочность сцепления на сдвиг при сжатии плазменного ЭИП от величины номинального контактного давления (сжимающего напряжения)

Литература

- 1. *Борисов Ю.С.* [*и др.*]. Газотермические покрытия из порошковых материалов: справочник. Киев: Наукова думка, 1987. 544 с.
- 2. Пузряков А.Ф. [u др.]. Технологии нанесения защитных и износостойких покрытий повышенной прочности. М.: Изд-во «Эко-Пресс», 2013. 300 с.

УДК 533.9.082.5

Макетирование оптического тракта диагностики спектроскопии водородных линий для установки ITER

Г.М. Асадулин, Е.Н. Андреенко, А.В. Горшков

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» Координационный центр «Управляемый термоядерный синтез – международные проекты»

Диагностика спектроскопии водородных линий H-alpha входит в список диагностик первой очереди и должна начать работу с первой плазмой на установке ITER. На данный момент разработка системы находится на уровне, на котором необходима апробация предлагаемых решений с оптической точки зрения на практике. Для этих целей создан макет оптического тракта. На данном этапе некоторые элементы тракта заменены аналогами. По мере изготовления точных макетов оптических элементов они будут встраиваться в систему. Макет включает в себя узел первого зеркала, в который поступает свет непосредственно из плазмы, два узла с перископической конструкцией, один из которых является системой автоматической подстройки, узел спектротелескопа, оптический узел в Port Cell, состоящий из согласующих линз, калибровочной камеры, и тестовой оптоволоконной сборки. Основными целями макетирования являются проверка выбранных оптических решений, отработка методик юстировки и калибровки тракта, а также реализация и отработка системы автоматической подстройки.

УДК 621.039.634

Проведение испытаний макетов первой стенки ИТЭР для изучения влияния тепловой нагрузки, приложенной к боковым граням плиток облицовки

В.Е. Кузнецов, Р.В. Рулёв

АО «НИИЭФА»

Первая стенка ИТЭР состоит из панелей, облицованных бериллиевыми плитками различного размера, обращенных к плазме. Нормальная тепловая нагрузка на эти панели будет варьироваться от 2 до 4,7 МВт/м² в зависимости от расположения этих панелей на внутренней части камеры реактора. Общие расчеты и основные эксперименты по выяснению ресурса той или иной конструкции таких панелей были проведены при условии, что тепловой поток падает на панель практически перпендикулярно с минимальными углами отклонения до 5 °. Но из-за зазоров между бериллиевыми плитками или из-за неточностей при изготовлении или монтаже панелей неизбежно появление боковых граней облицовки, на которые тепловая нагрузка будет приходиться под большими углами.

Боковые грани имеют больший угол падения тепловой нагрузки (15–90°), чем общая поверхность облицовки, обращенная к плазме, что связано с большей тепловой нагрузкой на отдельные плитки и может приводить к перегреву краев этих компонентов.

Перегрев отдельных плиток облицовки может привести к ускоренной деградации соединения между бериллиевыми плитками и подложкой, что в свою очередь может привести к полной потере теплового контакта и в конечном итоге к отсоединению плиток от панелей первой стенки. Потеря части защитной облицовки приведет к увеличенному износу охлаждаемых элементов первой стенки и потере герметичности панели в целом.

Для экспериментальной оценки последствий увеличенной нагрузки на плитки из-за нагрева боковых граней в АО «НИИЭФА» были изготовлены три небольших макета с бериллиевой облицовкой различного размера (12 × 12 мм и 16 × 16 мм).

На стенде тепловых испытаний «Цефей-М» проведен ряд тепловых испытаний с различными углами наклона поверхности макетов к источнику тепловой нагрузки и различными величинами тепловой нагрузки на боковую грань плиток.

В результате обработки полученных экспериментальных данных были выработаны критерии допустимой нагрузки на боковые грани бериллиевой облицовки.

В данном докладе описываются процесс испытаний макетов первой стенки ИТЭР для изучения влияния тепловой нагрузки, приложенной к боковым граням плиток облицовки, и выводы, сделанные из этих испытаний.

УДК 621.039.61

Эксперименты по обнаружению кризиса теплопередачи в макетах внутренних вертикальных мишеней дивертора ITER

В.Е. Кузнецов, А.В. Володин, А.И. Кокоулин, Б.Н. Степанов, А.С. Малышев

АО «НИИЭФА им. Д.В. Ефремова»

Описываются методики, использованные в ходе тепловых испытаний макетов внутренних мишеней дивертора ITER, по обнаружению предвестника кризиса теплопередачи. Испытания интенсивными тепловыми потоками проводились с плотностью нагрузки до 40 MBT/м². В работе приводятся экспериментальные данные, полученные от систем диагностики испытательного стенда, а также от дополнительных датчиков, установленных специально для эксперимента.

Для имитации интенсивных тепловых потоков из плазмы использовался электронный пучок с энергией электронов 60 кэВ. Для обеспечения теплосъема макеты были подключены к системе водяного охлаждения с управляемыми параметрами (температура, расход, давление). Датчики для обнаружения предвестника кризиса теплопередачи были установлены максимально близко к испытываемым макетам. Нагрузка электронным пучком осуществлялась в импульсном режиме с длительностью импульса 10 секунд (рис.1).



Рис. 1. Последние несколько импульсов с плотностью поглощенной мощности 40 MBт/м² перед разрушением макета, где Ф_{abs} и Ф_{abs moving average} – мгновенная и средняя поглощенная мощность соответственно

УДК 533.924

Применение квазистационарного плазменного ускорителя КСПУ-Т для моделирования вспышек излучения, характерных для ослабленного срыва ИТЭР

А.Д. Ярошевская, Д.В. Коваленко, Н.С. Климов, В.Л. Подковыров

Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований

Наиболее опасным с точки зрения разрушения защитных покрытий является режим срыва. Для его подавления предполагается применять напуск инертных газов – аргона, неона и их смеси с легкими газами, в вакуумную камеру на начальном этапе развития срыва. В результате этого часть энергии плазмы переизлучается в видимой и близкой ультрафиолетовой областях спектра, что также может являться причиной повреждения поверхности защитных покрытий вакуумной камеры [1]. Чтобы определить ресурс защитных покрытий и при необходимости внести коррективы в их конструкцию, требовалось измерить скорость эрозии макетов защитных покрытий первой стенки и диверторных пластин ИТЭР при многократном воздействии на их поверхность излучения с параметрами, характерными для ослабленного срыва (плотность энергии 0,05–0,5 МДж/м², длительность воздействия 0,2 мс–0,5 мс) [2].

Источник излучения с параметрами, ожидаемыми при переходных процессах в ИТЭР, реализован посредством преобразования кинетической энергии плазменного потока, генерируемого квазистационарным сильноточным плазменным ускорителем КСПУ–Т, в энергию излучения при торможении потока плазмы на твердотельной преграде. В качестве плазмообразующего вещества использовались аргон, водород и их смесь. В результате экспериментов получены зависимости КПД ускорителя, свойств разряда, скорости плазменного потока от процентного состава смеси. Определены энергетические параметры источника излучения, мощность, спектр, интенсивность излучения в течение разряда, длительность. Выявлены оптимальные значения соотношения аргон–водород в потоке плазмы КСПУ–Т для получения максимального значения мощности источника излучения.

Литература

- 1. ITER Physics Basis // Nuclear Fusion. 1999. V. 39. P. 2137.
- 2. Progress in the ITER Physics Basis // Nuclear Fusion. 2007. V. 47. S128.
- 3. *Коваленко Д.В.* [*u др.*]. Получение потоков аргоновой плазмы и преобразование их энергии в излучение на установке КСПУ–Т для моделирования радиационны нагрузок, характерных для ослабленного срыва ИТЭР // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2014. Т. 37. Вып. 4. С. 39–48.

УДК 533.924

Исследование продуктов эрозии при облучении вольфрама, стали и алюминия интенсивными потоками плазмы

М.А Ларченко, И.М. Позняк

Московский физико-технический институт (государственный университет) Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований

Во время переходных плазменных процессов в ИТЭР (ELM, срывы, вертикальные перемещения плазменного шнура) ожидается воздействие интенсивных потоков плазмы на защитные покрытия вакуумной камеры. При длительности воздействия t = 1–3 мс тепловые нагрузки на вольфрамовые (дивертор) и бериллиевые (первая стенка) облицовочные пластины будут доходить до Q = 80 МДж/м² [1], что соответствует фактору теплового воздействия F = Q/t^{0.5} F = 2500 МДж/м²с^{0.5} и существенно превосходит пороги плавления материалов.

Эрозия за счет испарения защитных пластин и образования металлической пыли может повлечь поступление примесей в горячую термоядерную плазму и вызвать ее радиационное охлаждение. Кроме этого, будет происходить сокращение срока службы защитных покрытий и накопление пыли в вакуумной камере токамака [1]. Для создания и проверки расчетно-теоретических моделей [2, 3], описывающих указанные процессы, нужны экспериментальные данные о поведении материалов под действием интенсивных плазменных потоков, а также – о свойствах образующихся продуктов эрозии. Получить такие данные являлось основной целью представленной работы.

Существующие токамаки не обладают достаточной мощностью, чтобы воспроизводить условия, ожидаемые во время переходных процессов в ИТЭР, поэтому для испытания материалов применяют плазменные ускорители, магнитные плазменные ловушки, лазеры, электронные и ионные пучки. В представленной работе эксперименты по облучению материалов плазмой были выполнены на исследовательской установке МК-200UG. Интенсивность плазменного потока, фактор теплового воздействия, энергия ионов, плотность и давление плазмы на МК-200UG близки к параметрам, ожидаемым во время срывов и ELM в ИТЭР [4].

В рамках представленной работы мишени из вольфрама, стали и алюминия в виде плоских пластин с размерами 6 × 12 см подвергали воздействию потока водородной плазмы длительностью 25 мкс, плотностью тепловой энергии до 10 МДж/м² (F ≤ 2000 МДж/м²с^{0,5}) и энергией ионов ≈ 1,5 кэВ. Взаимодействие плазмы с мишенями происходило в продольном магнитном поле величиной 1,5 Тл.

Для исследования формирования и динамики ионизованных паров материалов применялась восьмикадровая камера-обскура, чувствительная к излучению в мягком рентгеновском диапазоне. Получены данные о времени формирования, скорости распространения и длительности существования мишенной плазмы. Показано, что ее распространение происходит преимущественно вдоль силовых линий магнитного поля (рис. 1).

Капли, выбрасываемые с поверхности металлических мишеней, регистрировались при помощи фотокамеры. Типичный снимок, полученный в эксперименте с вольфрамовым образцом, представлен на рис. 2. Получены данные о направлении и интенсивности

выброса капель с вольфрамовой, стальной и алюминиевой мишеней. Проведена оценка скорости их движения.



Рис. 1. Динамика свечения приповерхностного плазменного слоя в мягком рентгеновском диапазоне. Поток водородной плазмы падает на мишень слева



Рис. 2. Треки капель, инжектируемых с вольфрамовой мишени. Поток водородной плазмы падает на мишень справа

- 1. Pitts R.A., Carpentier S., Escourbiac F. [et al.]. A full tungsten divertor for ITER: Physics issues and design status // J. Nucl. Mat. 2013. V. 438. P. S48–S56.
- 2. Bazylev B.N., Janeschitz G., Landman I.S. [et al.]. Melt damage simulation of W-macrobrush and divertor gaps after multiple transient events in ITER // J. Nucl. Mat. 2007. V. 363. P. 1011–1015.
- 3. *Pestchanyi S., Arkhipov N., Landman I. [et al.*]. Simulation of tungsten plasma transport along magnetic field under ELM-like heat loads // J. Nucl. Mat. 2013. V. 438. P. S459–S462.
- 4. Позняк И.М., Архипов Н.И., Карелов С.В. [и др.]. Свойства примесей вольфрама, образующихся в плазме при облучении вольфрамовых мишеней мощными плазменными потоками // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2014. Т. 37. № 1. С.70–79.

УДК 533.9.082.5

Исследование характеристик спектрометрического оборудования, созданного для диагностической системы «Активная спектроскопия ИТЭР»

А.Ю. Шабашов

Московский физико-технический институт (государственный университет) Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований

Для поддержания процессов в реакторе ИТЭР и управления его работой необходимо располагать данными о состоянии плазмы и количестве примесей в его камере. Одним из наиболее эффективных способов получения этих сведений является активная спектроскопия или корпускулярно-спектроскопическая диагностика высокотемпературной плазмы (наиболее общим является англоязычный термин Charge Exchange Recombination Spectroscopy или CXRS).

CXRS использует регистрацию электромагнитного излучения при инжекции пучка нейтральных атомов в плазму. Использование диагностики активная спектроскопия позволяет определить:

- температуру ионов,
- концентрацию лёгких примесей в объёме плазмы,
- скорость тороидального и полоидального вращения плазмы как целого.

Атомы примесей, находящиеся в плазме в виде голых атомов (ядер), перезаряжаясь на атомах пучка, превращаются в водородоподобные атомы с зарядом на единицу меньше заряда ядра. Образующийся ион находится в возбуждённом состоянии, которое снимается за счёт излучения. Причём наиболее вероятными оказываются переходы с $\Delta n = 1$. Для типичных примесных ионов, таких как He+, C5+ и O7+, спектральные линии подобных переходов лежат в ультрафиолетовой и видимой частях спектра. Для определения концентрации примеси достаточно наблюдать только одну спектральную линию для каждого сорта примеси. Выбирая переходы, лежащие в видимой области спектра, можно воспользоваться световодами и фокусирующей оптикой. Чаще всего для диагностики используются спектральные линии:

- HI (n = 3 \rightarrow 2), λ = 656,3 HM;
- HeII (n = 4 \rightarrow 3), λ = 468,6 HM;
- BeIV (n = 6 \rightarrow 5), λ = 465,8 HM;
- CVI (n = 8 \rightarrow 7), λ = 529,1 нм.

Концентрация примесей определятся по абсолютной интенсивности излучения спектральной линии. Ионная температура определяется по доплеровскому уширению [5].

В рамках данной работы были проведены лабораторные испытания составляющих системы CXRS ИТЭР: голографических дифракционных решёток и объективов, входящих в состав спектрометра, спектрометра в целом.

Для успешного использования активной спектроскопической диагностики на установке ИТЭР необходимо проводить измерения одновременно в трёх диапазонах видимого спектра: 486 ± 6 нм, 529 ± 6 нм и 656 ± 8 нм. При этом нужно располагать достаточно высоким пространственным разрешением, чтобы проводить точные измерения полуширины исследуемой спектральной линии (порядка нескольких нанометров).

В данной работе были определены технические характеристики голографических дифракционных решёток и объективов-апохроматов, входящих в состав трёхдиапазонного спектрометра-полихроматора, созданного для диагностики «Активная спектроскопия ИТЭР»; были исследованы характеристики спектрометра как целого.

В начале работы были измерены коэффициенты дифракции, пропускания и отражения голографических дифракционных решёток. Для этого измерялась мощность дифрагировавшего, прошедшего и отражённого лазерного излучения. Коэффициент дифракции всех решёток составил ≈ 0.4 (указанное в паспорте значение – 0.43), коэффициент пропускания для длин волн, на которые решётка не рассчитана, 0.76–0.88, коэффициент отражения ≤ 0.15 .

Далее аналогичным образом были измерены коэффициенты пропускания объективов-апохроматов. Для всех объективов во всех спектральных диапазонах, в которых проводились измерения, коэффициент пропускания составил ≈ 0,9. После этого была исследована разрешающая способность объективов. Для этого анализировалось изображение миры, полученное с помощью каждого объектива. В белом свете и в различных спектральных диапазонах оказалось возможным разрешить элемент с номером 25 миры № 3 (50 штр/мм). Такое разрешение позволяет работать с входной щелью шириной до 20 мкм.

Затем были определены коэффициенты пропускания спектрометра в различных каналах. Для этого проводились измерения мощности лазерного излучения, попавшего в спектрометр и прошедшего через каждый канал. Измерения проводились в том диапазоне длин волн, на который канал рассчитан. Таким образом, коэффициент пропускания в синем канале составил 0,27, в зелёном – 0,29, в красном – 0,25. С помощью спектра гелийнеоновой лампы, полученного в зелёном канале спектрометра, была определена его линейная дисперсия. Она составила 0,35–0,38 нм/мм в диапазоне длин волн от 530 до 536 нм (рис. 1). Также зависимость линейной дисперсии хорошо согласуется с теоретической зависимостью. Далее, зная величину линейной дисперсии, была определена разрешающая способность спектрометра в зелёном канале (рис. 2). Она составила 0,057 нм, чего достаточно для анализа профиля спектральных линий с полушириной порядка 1 нм.



Рис. 1. График зависимости обратной линейной дисперсии в зелёном канале спектрометра от длины волны



Рис. 2. Аппроксимация профиля линии излучения неона, наблюдаемой в зелёном канале спектрометра (центр линии – 531,4 нм, полуширина – 0,057 нм)

- 1. Fonck R.J., Darrow D.S., Jaehnig K.P. Determination of plasma-ion velocity distribution via charge-exchange recombination spectroscopy // Physical Review. 1984. V. 29. N 6.
- 2. Зиновьев А.Н., Афросимов В.В. Корпускулярно-спектроскопическая диагностика высокотемпературной плазмы. Диагностика плазмы / под ред. М.И. Пергамента. М.: Энергоатомиздат, 1990. Вып. 7. С. 56–111.

- 3. Тугаринов С.Н., Бейгман И.Л., Вайнштейн Л.А., Докука В.Н., Красильников А.В., Науменко Н.Н., Толстихина И.Ю., Хайрутдинов Р.Р. Разработка концепции активной спектроскопической диагностики с использованием диагностического пучка атомов, применительно к установке ИТЭР // Физика плазмы. 2004. Вып. 30. № 2.
- Тугаринов С.Н., Белокопытов А.А., Кулаков Д.М., Лукин А.В., Науменко Н.Н., Саттаров Ф.А., Серов В.В., Усольцева М.А., Хабанов Ф.О., Шигапова Н.М., Ярцев В.П. Трёхдиапазонный спектрометр высокого разрешения для диагностической системы «Активная спектроскопия» ИТЭР // Приборы и техника эксперимента. 2016. № 1.
- 5. Малышев В.И. Введение в экспериментальную спектроскопию. М.: Наука, 1979.
- 6. Зайдель А.Н., Островская Г.В., Островский Ю.И. Техника и практика спектроскопии. М.: Наука, 1972.
- 7. Kramida A., Ralchenko Yu., Reader J., and NIST ASD Team NIST Atomic Spectra Database. Available: http://physics.nist.gov/asd. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.

УДК 533.924

Исследование течения расплавленного слоя металла при условиях, которые характерны для быстрых плазменных процессов в ИТЭР

И.М. Позняк^{1,2}, В.М. Сафронов^{1,2,3}, В.Ю. Цыбенко^{,1,2}

¹ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований ²Московский физико-технический институт (государственный университет) ³Проектный центр ИТЭР

Предполагается, что во время быстрых плазменных процессов (ELM-событий и срывов) защитные покрытия дивертора и первой стенки токамака-реактора ИТЭР будут находиться под действием мощных тепловых потоков с плотностью мощности от 1 до 10 ГВт/м² (и более) [1]. При этом такие условия невозможно воспроизвести на существующих установках типа токамак, поэтому для модельных экспериментов используются плазменные ускорители или мощные электронные пучки.

В проведенных ранее экспериментах на плазменном ускорителе КСПУ-Т выполнялось облучение металлических покрытий потоками плазмы с параметрами, ожидаемыми при быстрых процессах в ИТЭР [2]. Было продемонстрировано, что облучение интенсивными потоками плазмы вызывает сильную эрозию материалов, основным механизмом которой является перемещение расплавленного слоя вдоль поверхности покрытий. Вследствие перемещения расплава на поверхности материала образуется кратер эрозии с волнообразным рельефом и кольцевым подъёмом на периферии. Эрозия такого типа вызовет уменьшение толщины защитных покрытий дивертора и первой стенки ИТЭР, что приведёт к снижению их ресурса.

На данный момент существует несколько проработанных гипотез и теорий движения расплава, включающих в свою основу разнообразную природу сил и механизмов, которые могут быть ответственны за перемещение расплава. Так, в статье [2] представлена гипотеза о перемещении расплава градиентом давления плазмы; в расчётнотеоретических работах [3, 4] в качестве основных компонент движущей силы учтены градиент поверхностного натяжения, сила Ампера и сила поверхностного трения между расплавом и плазмой. В [5] подробно описан возможный механизм воздействия приповерхностного плазменного потока на волны расплавленного слоя, так что «плазменный ветер» вдоль покрытия эффективно действует на боковую поверхность волн, и это приводит к интенсивному течению расплава со скоростью 1–10 м/с. Все представленные теории и гипотезы требуют развития и дальнейшей проверки в эксперименте.

В качестве продолжения работы по данной тематике проведены эксперименты на КСПУ-Т, в которых мишени из двух разных сортов нержавеющей стали – марки 09Х15Н8Ю-1 и AISI 304 (аналог 08Х18Н10) – были подвергнуты плазменному облучению

с длительностью 1 мс при двух различных максимальных тепловых нагрузках $Q = 1,05 \text{ MДж/m}^2$ и $Q = 1,5 \text{ MДж/m}^2$. Предполагалось, что на различных марках стали получатся отличающиеся картины течения расплава, характеризующиеся различным пространственным периодом и высотой волн. Согласно теоретической модели [5], это должно привести к разной скорости течения расплава – на поверхности с более высокими и частыми волнами скорость расплава была бы выше, а значит, получится более глубокий кратер эрозии. При этом условия облучения были выбраны так, чтобы максимальная тепловая нагрузка была больше 0,8–0,9 МДж/м², когда волны на поверхности расплава становятся выше 10 мкм и поддаются измерению с помощью имеющегося профилометра. При тепловых нагрузках более 2 МДж/м² на поверхности мишеней образуются струи, сильно вытянутые в радиальном направлении, и фактически теория [5] не применима.

Профили облучённых мишеней приведены на рис 1. и 2. Видно, что на поверхности стали 09X15H8Ю-1 волны имеют меньший пространственный период и в два-три раза большую высоту, чем на мишенях из AISI 304. Тем не менее кратеры эрозии не отличаются существенно по глубине, как можно было бы ожидать в соответствии с кубической зависимостью скорости расплава от высоты волн, приведенной в [5]. По результатам эксперимента сделаны следующие возможные предположения:

- «плазменный ветер» не является основной силой, обеспечивающей движение расплава;
- существует другой закон взаимодействия «плазменного ветра» и волн;
- сильное торможение расплава на неоднородностях подложки, влияние оказывает структура материала;
- существует сильная обратная связь по силам, тормозящим расплав, например, волна эффективно тормозится присоединяемой при ее движении массой расплава;
- большую роль играет нестационарность процесса не уравновешиваются разгоняющие и тормозящие силы за время облучения; волны растут на протяжении всего процесса с разным темпом на различных материалах.

В дальнейшем для проверки этих предположений планируется провести серию экспериментов по облучению других металлов и их сплавов, что позволит получить широкую вариацию структур расплавленного металла на поверхности покрытий. Также это поможет ответить на вопрос о причине отличий в параметрах неустойчивостей (волн) на разных металлах. Для проверки гипотезы о различии в скорости роста волн и неравномерности течения расплава предлагается эксперимент с варьированием продолжительности плазменного воздействия.



Рис. 5. Профили поверхности мишеней из нержавеющей стали после 10 экспозиций при Q = 1,05 $M\mbox{Д}\mbox{\it ж}/\mbox{\it м}^2$



Рис. 6. Профили поверхности мишеней из нержавеющей стали после 10 экспозиций при Q = 1,5 МДж/м²

Работа выполнена при поддержке Проектного центра ИТЭР.

Литература

- 1. *Roth J.* [*et al.*]. Recent analysis of key plasma wall interactions issues for ITER // Journal of Nuclear Materials. 2009. V. 390–391. P. 1–9.
- Позняк И.М., Климов Н.С., Подковыров В.Л., Сафронов В.М., Житлухин А.М., Коваленко Д.В. Эрозия металлов при воздействии интенсивных потоков плазмы // ВАНТ. Серия: термоядерный синтез. 2008. Т. 35. Вып. 4. С. 23–33.
- 3. Bazylev B., Wuerz H. Melt layer erosion of metallic armour targets during off-normal events of tokamaks // Journal of Nuclear Materials. 2002. V. 307-311. P. 69-73.
- Bazylev B.N., Janeschits G., Landman I.S., Pestchanyi S.E. Erosion of mucrobrush tungsten after multiple intense transient events in ITER // Fusion Engineering and Design. 2005. V. 75–79. P. 407– 411.
- 5. *Мартыненко Ю.В.* Эрозия поверхности металла в результате образования волнообразного рельефа под действием мощных плазменных потоков // ВАНТ. Серия: термоядерный синтез. 2012. Т. 35. Вып. 3. С. 41–43.

УДК 533.9.082.5

Радиометр гамма-излучения на основе синтетического алмаза

Д.А. Кумпилов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Рассматривается процесс работы измерительной системы с алмазными детекторами на основе кристаллов синтетического CVD-алмаза для измерения полей гамма-излучения. Исследуются два детектора, далее детектор А и детектор Б, с отличающимися конструкциями и эффективными объёмами рабочих тел 8.10⁻³ см³ и 3.10⁻⁵ см³ соответственно.

С использованием измеренных ранее параметров синтетического алмаза из [1–3] теоретически описывается процесс детектирования. А именно, отклик детектора представляет собой совокупность импульсов тока смещения, возникающих в результате комптоновского рассеяния попавшего в толщу находящегося в постоянном электрическом поле электродов рабочего тела гамма-кванта и образования комптон-электрона, который в процессе движения в кристалле образует множество электрон-дырочных пар.

Для каждого детектора измеряются спектры отклика регистрирующей системы на поля образцовых спектрометрических гамма-источников ²² Na (энергия квантов 1,27 МэВ) и ¹³⁷ Cs (энергия квантов 0,662 МэВ). По виду спектров измерены абсолютные чувствительности детекторов, составившие $(2.0 \pm 0.1) \cdot 10^{-3}$ см² для детектора A и $(2.0 \pm 0.1) \cdot 10^{-4}$ см² для детектора Б. Показано, что уменьшение эффективного объёма рабочего тела существенно снижает чувствительность, что позволяет успешно регистрировать потоки высокой плотности вплоть до $2 \cdot 10^{11}$ с⁻¹ см⁻². Низкая чувствительность позволяет

использовать данный детектор в самых разных условиях для эффективной регистрации гамма-излучения, в том числе и на ИТЭР.

Спектры отклика для детекторов А и Б представлены на рис. 1 и 2 соответственно. Значение отсчётов в каждой точке кривых соответствует усреднённому по реальным измеренным значениям в соседних точках полученных спектров.



Рис. 1. Спектры отклика детектора A на излучение ОСГИ $^{^{22}} \mathrm{Na}~\mathrm{u}^{^{137}} \mathrm{Cs}$



Рис. 2. Спектры отклика детектора Б на излучение ОСГИ $^{^{22}}$ Na и $^{^{137}}$ Cs

- 1. *Красильников А.В., Квасков В.Б.* Алмаз и ионизирующее излучение. Природные алмазы России. М.: Полярон, 1997.
- 2. Амосов В.Н, Родионов Н.Б. [и др.]. Разработка радиометра гамма-излучения на основе синтетического алмазного материала // Прикладная физика. 2012. № 3.
- 3. Balmer R.S., Brandon J.R. [et al.]. Chemical vapour deposition synthetic diamond: materials, technology and applications// J. Phys.: Condens. Matter. 2009. 21.

УДК 533.924

Моделирование плавления и образования капель вольфрама при нагреве импульсным электронным пучком

В.А. Попов^{1,2}, А.С. Аракчеев^{1,2}, А.А. Васильев¹, Л.Н. Вячеславов¹

¹Институт ядерной физики им. БУДКера ² Новосибирский государственный университет

В будущих термоядерных установках условия на стенке будут отличаться от современных. Например, давление термоядерной плазмы будет меньшим при той же отдаваемой на стенку мощности по сравнению с существующей на современных установках. Поэтому необходимо моделирование различными возможными способами. Для моделирования импульсных тепловых нагрузок на стенки, обусловленных неустойчивостями в ИЯФе, применяют электронный пучок [2]. Известно, что электронный пучок слабее экранируется паром из-за большой длины пробега в веществе. Нами был смоделирован нагрев вольфрама электронным пучком и показано, что температура поверхности достигает 7000 К при параметрах, сходных с ЭЛМами. В этих условиях становится существенной мощность охлаждения поверхности, обусловленная испарением. Было показано [1], что охлаждение приводит к насыщению температуры поверхности. Что приводит к тому, что слой поверхности толщиной, сравнимой с длиной пробега электрона, разогревается до температур, более высоких, чем температура поверхности. Поскольку электронный пучок практически не оказывает давления на материал, давление в нём обусловлено давлением насыщенных паров на поверхности материала. Поскольку температура под поверхностью становится выше, то и давление насыщенных паров в глубине выше. Жидкость становится перегретой, что может привести к кипению вещества. Оценки показывают, что скорость капель зависит от распределения газа в уносящемся потоке. Для количественного предсказания в представляемой работе производится моделирование разлёта газа, образовавшегося в результате испарения вольфрама. На основании полученных результатов планируется вычислить зависимости скорости и размера частиц от времени и проверить модель образования капель.

Литература

- 1. Popov V.A., Arakcheev A.S., Burdakov A.V., Kasatov A.A., Vasilyev A.A., Vyacheslavov L.N. Theoretical modeling of shielding for plasma flow and electron beam heating // AIP Conf. Proc. 2016. V. 1771.
- 2. *Vasilyev A.A* [*et.al.*] Observation of the tungsten surface damage under ITER-relevant transient heat loads during and after electron beam pulse // AIP Conf. Proc. 2016. V.1771.

УДК 533.924

Захват и десорбция водорода из вольфрама с пленками оксидов бериллия/алюминия при облучении плазмой

Л.Б. Беграмбеков, А.С. Каплевский, С.С. Довганюк, А.Е. Евсин

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

1. Введение

В работах [1, 2] поверхность нержавеющей стали облучалась атомами дейтерия в кислородосодержащей атмосфере и ионами дейтериевой плазмы с примесью кислорода. В обоих случаях проникновение изотопов водорода через поверхность нержавеющей стали значительно активизировалось (явление активированного проникновения через поверхность – АПП) при сравнительно низких температурах (≈ 300 K): увеличивались и захват дейтерия, и десорбция водорода, находящегося в стали. Предположено, что явление АПП является следствием серии поверхностных реакций, активируемых при взаимодействии кислорода и атомов/ионов изотопов водорода со слоем оксида хрома на

поверхности нержавеющей стали. Бериллий и вольфрам, выбранные соответственно в качестве материалов первой стенки и дивертора токамака ИТЭР, также имеют оксидные слои на поверхности. Во время работы токамака бериллий будет распыляться и осаждаться на вольфрамовых тайлах, формируя на их поверхности бериллиевые пленки.

Целью данной работы было проверить, развивается ли явление АПП на оксидированной поверхности вольфрама и на поверхности слоя бериллия на вольфраме, также исследовать характер транспорта водорода между вольфрамом и пленкой бериллия в процессе ионной бомбардировки.

2. Экспериментальная методика

Эксперименты проводились в установке «МИКМА» [3]. Использовались образцы вольфрама и вольфрама с пленками бериллия и алюминия. Пленки бериллия толщиной 100 ± 10 нм осаждались на вольфрамовые образцы в Национальном институте лазерной, плазменной и радиационной физики (Бухарест, Румыния). В нашем распоряжении было лишь ограниченное количество образцов с бериллиевым покрытием. Поэтому после того как мы удостоверились, что результаты экспериментов с образцами вольфрама со слоями бериллия и алюминия похожи, последние использовалась для подробного изучения закономерностей явления АПП на вольфраме с поверхностным покрытием.

Алюминиевые пленки толщиной 200 ± 10 нм формировались на вольфраме атомами алюминия, распыляемыми с алюминиевой мишени ионами аргоновой плазмы в НИЯУ «МИФИ». Изготавливались вольфрамовые образцы, покрытые пленкой алюминия с обеих сторон и только с одной стороны. На этапе подготовки к осаждению покрытий из вольфрамовых образцов при отжиге удалялся «технологический» водород. При напылении на вольфрам поверхностные слои захватывали водород из остаточного газа, а при контакте с атмосферой на их поверхности образовывалась пленка оксида. Измерения методами рентгеновской энергодисперсионной спектрометрии (ЭДС), вторичной ионной массспектрометрии (ВИМС) и ТДС показали, что концентрации водорода и кислорода в пленках алюминия составляли 35 и 13 ат. %, а в пленках бериллия 40 и 9 ат. % соответственно.

Образцы вольфрама и вольфрама, покрытого с обеих сторон пленками бериллия/алюминия, имплантировались ионами дейтериевой плазмы. Параметры имплантации были следующими: энергия ионов E = 50 эВ/ат, плотность потока ионов $j = 3,7 \cdot 10^{19}$ ат/м²с, доза облучения $\Phi = 1,3 \cdot 10^{23}$ ат/м², температура образцов во время облучения T = 500 К. Образцы вольфрама с пленкой алюминия на одной из сторон имплантировались дейтерием со стороны, непокрытой слоем алюминия, с аналогичными параметрами, за исключением энергии ионов, которая составляла 650 эВ/ат.

После имплантации образцы облучались водородной плазмой с 2-процентной примесью кислорода. Образцы вольфрама с пленкой алюминия на одной из сторон облучались со стороны, покрытой пленкой алюминия. Параметры облучения в H₂ + 2% O₂ плазме: E = 50 эB/ат, $j = 3,7 \cdot 10^{19}$ ат/м²с, $\Phi = 1,3 \cdot 10^{23}$ ат/м², T = 500 К. Затем методом ТДС определялось, как изменилось содержание дейтерия и водорода в образцах.

3. Результаты экспериментов и их обсуждение

3.1. Явление АПП на поверхности вольфрама с пленками бериллия/алюминия и без них

Видно, что имплантация дейтерия в вольфрам с пленкой бериллия и алюминия приводит к увеличению в $\approx 2-3$ раза количества захваченных атомов дейтерия по сравнению с вольфрамом без пленок (табл. 1, столбец 2). В то же время при последующем облучении образцов ионами H₂ + 2% O₂ с энергией 50 эВ/ат (практически не распыляющих поверхность образцов) из вольфрама со слоями бериллия и алюминия удаляется значительное и примерно одинаковое количество атомов дейтерия (13–15) $\cdot 10^{19}$ ат/м² (табл. 1, столбцы 3 и 5). Из вольфрама при этом также удаляется 7,8 $\cdot 10^{19}$ ат/м² дейтерия. Можно сделать вывод о том, что явление АПП развивается как на оксидированной

поверхности вольфрама, так и на поверхностях оксидированных слоёв бериллия и алюминия. Причем интенсивности явления АПП на поверхности пленок бериллия и алюминия близки. Поэтому в последующих экспериментах использовались пленки алюминия на вольфраме.

3.2. Особенности явления АПП при внедрении дейтерия в «вольфрамовую» сторону образца и последующего облучения «алюминиевой» стороны H₂+2% O₂ плазмой

Эксперименты показали, что примерно половина имплантированных в вольфрам атомов дейтерия проникла в пленку алюминия и была удалена с ее поверхности в процессе облучения в водородной плазме с примесью кислорода. Имея в виду сходство проявлений развития АПП на поверхности алюминиевых и бериллиевых слоёв, можно заключить, что значительная часть дейтерия, находящаяся в вольфраме со слоем бериллия, также будет десорбироваться при его облучении ионами водородной плазмы с примесью кислорода. Следовательно, можно сделать вывод о том, что низкотемпературное облучение дейтериевой плазмой с примесью кислорода может быть использовано для детритизации вольфрамовых тайлов дивертора ИТЭР, в том числе запылённых бериллием, а также бериллиевых тайлов первой стенки.

4. Заключение

Показано, что активированное проникновения изотопов водорода через оксидированную поверхность происходит во всех исследованных случаях. Интенсивности явления АПП на поверхности пленок бериллия и алюминия близки. Облучение оксидированной поверхности алюминиевой пленки низкоэнергетичными ионами H₂ + 2% O₂ плазмы инициировало проникновение предварительно имплантированного в вольфрам дейтерия в алюминиевый слой и затем десорбцию из него половины атомов дейтерия, внедрённых в вольфрам.

Сделано заключение о том, что явление АПП можно использовать для детритизации вольфрамовых тайлов дивертора как покрытых, так и не покрытых слоем бериллия, и бериллиевых тайлов первой стенки ИТЭР.

Таблица 1

Количество атомов дейтерия и водорода в образцах вольфрама без покрытий (W) и с пленками бериллия (W_{Be}) и алюминия (W_{Al}) после имплантации дейтерия и последующего облучения в H₂ +2% O₂ плазме

	Количество дейтерия в образце, $\times 10^{19} \text{ at/m}^2$		Количество водорода в образце, $\times 10^{20}$ ат/м ²	
1	2	3	4	5
Образец	До облучения в H ₂ +2% O ₂	После облучения в H ₂ +2% O ₂	До облучения в H ₂ +2% O ₂	После облучения в H ₂ +2% O ₂
W	9.4	1.6	0.6	0.4
W _{Be}	16.0	3.1	6.5	4.1
W _{Al}	28.0	13.0	21.4	48.2

- 1. Dvoichenkova O., Airapetov A. Surface processes and hydrogen transport through the stainless steel surface under atom and ion irradiation // Phys. Procedia. 2015. V. 71. P. 93–98.
- Begrambekov L., Grunin A. [et al.]. Gas exchange processes initiated by the inelastic collisions of hydrogen plasma particles with a stainless-steel surface // J. of Surf. Inv. X-ray, Syn. and Neut. Tech. 2015. V. 9. P. 190–195.
- 3. Airapetov A., Begrambekov L., Bremond S. [et al.]. Glow discharge cleaning of carbon fiber composite and stainless steel // J. Nucl. Mater. 2011. V. 415. P. 1042–1045.

Построение АСУ системы вакуумной откачки токамака на примере термоядерной установки Т-15МД

И.С. Образцов, М.М. Соколов

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В настоящее время в НИЦ «Курчатовский институт» модернизируется экспериментальный термоядерный реактор токамак Т-15МД, предназначенный для проведения исследований в области управляемого синтеза, в том числе в поддержку проекта ИТЭР [1].

Одним из главных условий протекания управляемого термоядерного синтеза в установках данного типа является достижение и поддержание устойчивого вакуума в разрядной камере токамака. В термоядерном реакторе Т-15МД данную функцию выполняет система вакуумной откачки (СВО), работа которой должна проходить в автоматическом режиме с обратной связью от датчиков давления. Для решения данной задачи была разработана автоматизированная система управления (АСУ СВО), входящая в состав информационно-управляющей системы (ИУС) токамака Т–15МД [2].

Получение вакуумных рабочих давлений в объектах установки Т-15МД производится в два этапа:

- предварительная откачка до давления ~ 10 Па;
- высоковакуумная (турбомолекулярная) откачка до давления < 5·10⁻⁴ Па.

Для автоматизации данных технологических процессов спроектирован комплекс программно-технических средств АСУ СВО, имеющий разветвленную структуру с распределенным вводом-выводом и централизованной обработкой сигналов. Функциональная структура АСУ СВО показана на рис. 1.

Технологическое оборудование CBO состоит из шестнадцати вакуумных ячеек четырех типов, каждая из которых выполняет конкретные этапы вакуумной откачки из определенного объема. Согласно расположению данных ячеек для минимизации количества и длин кабельных трасс была разработана схема расстановки шкафов распределенного ввода-вывода (ШРВВ) в количестве 10 единиц.

ШРВВ обеспечивают: сбор сигналов с исполнительных механизмов и датчиков по физическим линиям связи; выдачу управляющих сигналов, сформированных в системе, на исполнительные механизмы технологического оборудования СВО; сбор информации с масс-спектрометров по интерфейсу RS-232.

Сигнальные линии внутри ШРВВ в зависимости от их типа подключены к модулям: ввода аналоговых сигналов, ввода дискретных сигналов, вывода дискретных сигналов серии Modicon Quantum компании Schneider Electric. Аналоговые сигналы от датчиков давления OT-1 WIKA, низкого вакуума VSP62MV и высокого вакуума VSM72MW Thyracont Vacuum Instruments оцифровываются 16-битным модулем ввода аналоговых сигналов 140AVI03000 Schneider Electric.

ШРВВ осуществляют связь между собой и шкафом программируемого логического контроллера (ПЛК) при помощи процессоров сети Ethernet RIO 140CRP31200 Schneider Electric. Данные от модулей ввода поступают на процессорный модуль Modicon Quantum 140CPU67160, в котором исполняется программа управления процессом вакуумной откачки.

Для повышения отказоустойчивости в шкафе ПЛК установлено два процессорных модуля, поддерживающих горячее резервирование и топологию «daisy chain loop». В случае обрыва кабеля или выхода из строя одного из устройств удалённого ввода-вывода, время восстановления работоспособности всей системы составляет менее 50 мс.

По протоколу Modbus TCP через сеть Fast Ethernet шкаф ПЛК обеспечивает: информационное взаимодействие с центральной системой управления (ЦСУ), программнотехническим комплексом общесистемной противоаварийной защиты (ОСАЗ), локальным пультом управления (ЛПУ); организует сеть Ethernet для информационного обмена APM TC и APM CBO с гамма-масс-спектрометрами.

Исполняемая программа ПЛК реализована в среде Unity Pro XL v7.0, на языке программирования ST. Человеко-машинные интерфейсы АСУ СВО и связь с верхним уровнем ИУС реализованы средствами Wonderware InTouch.

АСУ СВО выполняет следующие группы функций: информационные, управляющие и вспомогательные; взаимодействует с вышестоящими (центральная система управления) и смежными (общая система противоаварийных защит) автоматизированными системами управления; построена на базе современных программируемых логических контроллеров серии Modicon Quantum фирмы Schneider Electric; использует эффективные человеко-машинные интерфейсы и средства визуализации информации Wonderware InTouch. В ходе реализации АСУ СВО Т-15 МД получены решения, которые можно использовать также при создании перспективных установок, таких как ДЕМО и ИГНИТОР.

Физический пуск токамака Т-15МД запланирован на 2019 г.



Рис. 1. Функциональная структура АСУ СВО

Работа выполнена при поддержке Госкорпорации РОСАТОМ (Контракт № Н.4х.241.9Б.17.1011).

- 1. *Khvostenko P.P., Anashkin I.O., Belyakov V.A.* [*et al.*] Status of Tokamak T-15MD // 26th IAEA Fusion Energy Conference (CN-234), FIP/P7-40.
- 2. Моцкин Ю.Я., Соколов М.М., Хвостенко П.П. Информационно-управляющая система экспериментальной термоядерной установки «Токамак Т-15» // Мир компьютерной автоматизации: встраиваемые компьютерные системы. 2015. № 03. С. 29–37.

Архитектура информационных сетей экспериментальных термоядерных установок на примере токамака Т-15МД

М.В. Чуканов, М.М. Соколов

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В НИЦ «Курчатовский институт» выполняются работы по модернизации экспериментальной термоядерной установки токамак Т-15. Новая установка Т-15МД будет иметь вытянутую диверторную конфигурацию плазменного шнура с аспектным отношением 2,2, током плазмы 2 МА в магнитном поле 2 Т и квазистационарные системы дополнительного нагрева с суммарной мощностью до 20 МВт. Установка рассчитана на длительность импульса до 30 с [1]. На установке будут проводиться эксперименты в поддержку развития технологий управления термоядерного синтеза и проекта ИТЭР.

Автоматизация всех стадий подготовки и проведения экспериментальных и исследовательских работ на установке осуществляется распределенной информационноуправляющей системой (ИУС) Т-15МД, в состав которой входят следующие компоненты:

- АСУ инженерных систем;
- АСУ технологических систем подготовки токамака к плазменному эксперименту;
- АСУ системы импульсного электропитания магнитных обмоток токамака;
- АСУ систем дополнительного нагрева и поддержания тока плазмы;
- система управления плазмой;
- система сбора экспериментальных данных;
- система координации и синхронизации скоростных систем;
- центральная система управления (ЦСУ), ЛВС и центр обработки данных.

Автоматизация и противоаварийная защита медленных процессов (характерная длительность цикла управления 100 мс), происходящих в инженерных и технологических системах токамака T-15 во время подготовки к эксперименту, реализована на основе платформы Schneider electric / Unity Pro и Intouch Wonderware. Для систем автоматизации быстрых процессов (характерная длительность цикла управления 1 мсек), происходящих в электрофизических системах токамака во время эксперимента, а также для системы сбора экспериментальных данных выбрана платформа National Instruments / LabVIEW. Координация быстрых систем осуществляется в сети рефлективной памяти Abaco GE5565, а для импульсной синхронизации используется оборудование VME Caen и Highland technology. В качестве серверного оборудования ИУС T-15MД используются серверы HP ProLiant под управлением MS Windows server 2012. Таким образом, все системы автоматизации токамака T-15MД реализованы на основе индустриальных решений.

Для работы с экспериментальными данными используется разработанный для установки T-10 программный комплекс, включающий в себя БД DASSQL, интернет-сервис удаленного доступа DASTCP, графическую оболочку для поиска, экспресс-обработки и визуализации экспериментальных данных DASTools, а также библиотеку DASAccess для доступа к БД DASSQL из пользовательских приложений [2].

Токамак Т-15МД представляет собой сложный комплекс взаимодействующих между собой инженерных, технологических и электрофизических систем, распределенных по территории нескольких зданий. ИУС Т-15МД состоит более чем из двадцати подсистем, включающих около 100 шкафов автоматизации. Планируемое количество диагностических каналов более 3000 (с объемом данных около 90 Гб за импульс), управляющих каналов около 8000, каналов импульсной синхронизации около 18. Сложные электромагнитные условия вблизи работающего токамака и возможность наличия высокого потенциала на части оборудования приводит к необходимости использования оптических сетей, а также к необходимости размещать компьютерное оборудование В защищенном от электромагнитных воздействий месте. Взаимодействие между подсистемами ИУС Т-15МД осуществляет семь типов информационных сетей, большая часть которых использует оптоволоконную среду.

ЛВС ИУС Т-15МД строится на базе коммутаторов Сіясо второго-третьего уровня, максимальная скорость обмена информацией будет достигнута посредствам агрегирования каналов между ключевыми элементами сети. Учитывая два режима работы сети передачи данных – рабочего и отладочного – особое внимание уделяется организации сетевого взаимодействия. В рабочем режиме ограничивается взаимодействие между подсистемами, АРМами, а также исключается возможность влияния на систему из внешней среды (Интернет). Отладочный режим работы подразумевает не только сетевое взаимодействие, но и обновление программного обеспечения, а также привлечение к работе удаленных ресурсов и пользователей. Для обеспечения необходимого уровня безопасности и защиты информации организуются групповые политики на контроллере домена, управление сертификатами, аудит, мониторинг а также организуется автоматическое резервирование ключевых данных, в том числе и полученных во время проведения эксперимента.

Одним из важнейших компонентов ИУС Т-15МД является система координации и синхронизации скоростных систем (СКСС) [3], т.е. систем, управляющих работой эксперимента обеспечивающих **vстановки** непосредственно В ходе И сбор экспериментальных данных. Назначение СКСС состоит в том, чтобы по заданной циклограмме эксперимента, включающей в себя как статические (заланные метками времени), так и динамические (детектируемые) события, обеспечить синхронную и скоординированную работу систем токамака в процессе плазменного эксперимента с точностью синхронизации 1 мкс. Архитектура СКСС и ее взаимодействие с системами управления показаны на рис. 1.

Физический пуск токамака Т-15МД запланирован на 2019г.



Рис. 1. Архитектура СКСС

Работа выполнена при поддержке Госкорпорации РОСАТОМ (Контракт № Н.4х.241.9Б.17.1011).

- 1. *Khvostenko P.P., Anashkin I.O., Belyakov V.A.* [*et al.*] // Status of Tokamak T-15MD. 26th IAEA Fusion Energy Conference (CN-234), FIP/P7-40.
- Игонькина Г.Б., Соколов М.М. Унификация доступа к экспериментальным данным установок управляемого термоядерного синтеза // Труды Всероссийской научной конференции «Научный сервис в сети Интернет», г. Новороссийск, 18–23 сентября 2006. Изд-во МГУ. 2006. С. 242–244.
- 3. *Моцкин Ю.Я., Соколов М.М., Хвостенко П.П.* Информационно-управляющая система экспериментальной термоядерной установки «Токамак Т-15» // Мир компьютерной автоматизации: встраиваемые компьютерные системы. 2015. № 03. С. 29–37.

Экспериментальный стенд тестирования материалов потоками ионов высокой плотности мощности

Л.Б. Беграмбеков, А.В. Грунин, Н.А. Пунтаков

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Введение

Взаимодействие ионов с поверхностью является хорошо изученной областью физики, однако в большинстве работ, представленных по данной теме, поток частиц на образец не превышает $10^{19}-10^{22}$ ион/м²с. Например, в статье [1] показано, что химическое распыление графита уменьшается с увеличением потока частиц. Максимальное значение потока частиц, при котором проводился эксперимент по распылению графита, составляло 10^{24} ион/м²с. В работе [2] с помощью потока ионов водорода высокой плотности на вольфраме формировали блистеры. Температура образца составляла 480–520 К, что является благоприятной температурой для образования блистеров на меди, находясь в пределах (0,3–0,4) T_{nn} . Для флекинга и плавления отшелушившихся частиц также можно провести сравнение с медью, так как данные эффекты произошли при соответствующих температурах. Это прямо указывает на изменение свойств материала при облучении потоком частиц высокой плотности мощности, при этом могут появляться ранее неизвестные свойства.

Ускорители квазистационарной плазмы, такие как QSPA-T [3] или QSPA-Kh50 [4], способны производить высокие тепловые импульсные нагрузки (порядка $\Gamma BT/M^2$), однако продолжительность пульсов меньше 1 мс, и после каждого импульса установка должна «перезарядиться» в течение нескольких минут. Таким образом, стандартное исследование материалов занимает до 100 импульсов. Типичная частота ELMoв в ITERe порядка десятка Гц. Высокие тепловые нагрузки можно достичь с помощью электронного пучка, такого, как в установке JUDITH II [5]. В этой установке электронный пучок высокой фокусировки сканирует площадь образца, приводя к желаемому среднему тепловому потоку. Источники плазмы высокой плотности используются в таких установках, как Magnum-PSI [6], MARION [7] и PISCES [8]. Они позводяют тестировать материалы в стационарном режиме при плотностях мощности до 20 MBT/ M^2 . Время работы ограничено в пределах нескольких десятков или сотен секунд. Кроме того, в Magnum-PSI возможна работа в комбинированном стационарно-импульсном режиме. Однако эти установки довольно сложны и требуют инфраструктуру и персонал для обслуживания и работы.

Установка, способная облучать образцы ионным и электронным пучками плотности мощности до 200 MBт/м² в стационарном и импульсном режимах, представлена в данной работе.

Экспериментальная установка

Схема экспериментальной установки показана на рис. 1. Установка имеет цилиндрическую вакуумную камеру (1) с цилиндрической плазменной камерой (2) внутри. Вся система имеет осевую симметрию. Плазменный разряд инициируется между вольфрамовым катодом (3) и кольцевым анодом (4). Стандартные значения тока разряда – в пределе 2–20 А. Распыление катода замедляется использованием низкого напряжения разряда – 50–80 В. Анод состоит из двух колец с промежутком между ними. Через этот промежуток ионы или электроны вытягиваются на образец. Внешнее анодное кольцо можно двигать с помощью ввода (5). Таким образом, можно изменять геометрию плазменного мениска и форму ионного пучка. Остаточный вакуум в установке не превышает 10^{-6} Па. Шлюзовая камера (7) находится внизу установки и позволяет быстро поменять образцы без развакуумирования установки. Шибер (8) закрывается, когда давление в шлюзовой камере поднимается до атмосферного. Ввод (9) с фторопластовым уплотнением используется для передвижения держателя образца.

Образец (10), подвергаемый испытаниям, закреплён на держателе (11), передвигаемом с помощью полированной стальной трубки (12). Держатель образца является плоским медным столиком, активно охлаждается снизу. Для подачи потенциала в вакуумную камеру установлен электрический ввод (13). Когда держатель образца вводится в вакуумную камеру, между ним и электрическим вводом устанавливается контакт, позволяя подать на образец потенциал. Медный столик соединён с трубкой из нержавеющей стали через цилиндрический керамический изолятор, выдерживающий разность потенциалов > 30 кВ. Диэлектрическая кремний-органическая жидкость с низкой вязкостью используется для охлаждения столика. Эта жидкость циркулирует в закрытой системе с водяным теплоотводом. Температуру образца во время эксперимента можно изменять путём вставки специальных прокладок между образцом и столиком. Температура образца измеряется оптическим пирометром через иллюминатор в верхней части вакуумной камеры.

Форма пучка регулируется различными факторами: потенциал на образце, плотность плазмы, расположение образца относительно плазменной камеры и промежуток между анодными кольцами. Изменяя данные факторы, можно изменить размер пятна пучка на образце. Таким образом, можно достичь желаемого теплового потока независимо от подаваемого потенциала. Максимальная плотность мощности достигается при высокой фокусировке пучка. Расчёт показывает, что пучок мощностью 4 кВт и диаметром 5 мм имеет среднюю плотность мощности 200 МВт/м².

Первые экспериментальные результаты

Первые эксперименты на установке были проведены на образцах из графита марки МПГ-8. В качестве рабочего газа использовался водород. Ток ионов при облучении составлял 100 мА, энергия ионов 15 кэВ. После 15-минутного облучения образца сфокусированным ионным пучком на образце появился макроскопический кратер. Размер кратера определялся с помощью контактного профилометра. Его диаметр был 3 мм, а максимальная глубина – 50 мкм. Зная форму кратера, можно было определить форму пучка и рассчитать плотность мощности. Расчёт показал, что плотность мощности пучка в центре достигала 270 МВт/м². Образец не охлаждался во время облучения, и его температура составляла 1300 К. Изображение поверхности образца после облучения представлено на рис. 2.

Размеры зёрен графита МПГ-8 находятся в интервале 15–25 мкм, их можно увидеть на фотографиях. На поверхности зёрен наблюдается более мелкий рельеф с типичным размером около 1 мкм. Во время облучения зёрна распыляются, и открываются поры между зёрнами. Мелкий рельеф на зёрнах образуется уже после пяти минут облучения и не изменяется со временем. Образец был разломан для того, чтобы можно было исследовать его сечение. Наблюдались ярко выраженные зёрна размером 15–25 мкм без следов рельефа. Таким образом, было сделано предположение, что мелкий рельеф является следствием процессов распыления и перенапыления на поверхности, а не структурой в толще образца.

Следует заметить, что подобное изменение поверхности наблюдалось и при меньших плотностях мощности пучка. В данном случае не было найдено эффектов, присущих данному показателю плотности мощности.

Заключение

Представлена лабораторная установка, способная облучать материалы ионным, либо электронным пучком высокой плотности мощности. Установка проста в управлении и полностью автоматизирована, позволяет облучать образцы в импульсном режиме, стационарном режиме, а также комбинированном стационарно-импульсном режиме. Изменяя размер пучка, можно достичь плотности мощности до 270 MBt/m², что было доказано на тестовом эксперименте с образцом из графита марки МПГ-8.



Рис. 1. Схема экспериментального стенда



Рис. 2. Поверхность образца после облучения. а) – 5 мин, б) – 10 мин

Литература

- 1. Roth J., Preuss R., Bohmeyer W., Brezinsek S. [et al.] // Nucl. Fusion. 2004. 44. L21.
- 2. Snu W.M., Nakamichi M, Alimov V.KH., Luo G.-N., Isobe K., Yamanishi T. [et al.] // J. of Nucl. Mater. 2009. 390–391. 1071.
- 3. Klimov N., [et al.] // J. Nucl. Mater. 2009. V. 390-391. P. 721-726.
- 4. Garkusha I.E., [et al.] // J. of Nucl. Mater. 2007. V. 363–365, p. 1021–1025.
- 5. *Majerus P.*, [*et al.*] // Fusion Engineering and Design. 2005. V. 75–79. P. 365–369.
- 6. De Temmerman G., [et al.] // Fusion Engineering and Design. 2013. V. 88. P. 483–487.
- 7. Nicolai D., [et al.] // Fusion Engineering and Design. 2013. V. 88. P. 2506–2509.
- 8. Goebel D.M., [et al.] // J. Nucl. Mater. 1984. V. 121. P. 277–282.

УДК 533.9.08 + 537.29

Модель электростатического зонда для сбора вольфрамовой пыли в ITER

Л.Б. Беграмбеков, А.Н. Войтюк, А.М. Захаров, О.А. Бидлевич

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Образование пылевых частиц и их конгломератов с размерами от долей микрона до десятков и сотен микрон отмечается во многих современных плазменных установках. Накопление пыли может существенно повлиять на параметры разряда в будущих термоядерных установках и привести к аккумулированию опасно больших количеств трития. Поэтому разработка методов сбора и транспортировки пыли из установок для последующего измерения скорости ее формирования и осаждения является актуальным направлением.

В работе представлены описание конструкции и результаты испытаний электростатического зонда для сбора электропроводящей пыли в термоядерной установке и

транспортировки пыли за пределы установки для последующего анализа. Приведены результаты экспериментов по сбору зондом металлической пыли двух различных типов в вакууме при давлении около $1,4 \cdot 10^{-2}$ Па и в атмосфере осушенного азота. Эксперименты проводились при стационарном состоянии зонда относительно поверхности со слоем пыли и при его передвижении относительно пыли.

Основным элементом зонда является резервуар из тонкой листовой нержавеющей стали (рис. 4). Наклонная стенка зонда выполнена из жалюзи. Ширина зонда составляет 25 мм, высота – 10 мм, длина плоского основания – 30 мм, длина крышки – 50 мм. В процессе работы между зондом и поверхностью, покрытой пылью, создается разность потенциалов, достаточная для того, чтобы пылевые частицы под действием электростатического поля преодолели силу тяжести и силы адгезии к поверхности, покинули пластину и попали в резервуар зонда сквозь жалюзи. При движении зонда параллельно поверхности так, что наклонная стенка с жалюзи находится впереди по направлению движения, производится очистка поверхности от пыли.

В экспериментах использованы два типа вольфрамовой пыли. Это пыль, частички которой представляли собой плоские чешуйки (рис. 2, 3) с поперечными размерами в диапазоне 10–500 мкм и толщиной в 2–4 мкм и пыль, состоящая из микрокристаллических частиц (рис. 1), имеющих чаще всего форму параллепипедов и размеры в диапазоне 1-10 мкм. Чешуйчатые частицы производились в установке плазменного осаждения покрытий «ДЕКОР» [1]. В установке зажигался газовый разряд в атмосфере аргона с примесью водорода. В области газового разряда размещалась вольфрамовая мишень, которая распылялась ионами плазмы при подаче на неё отрицательного относительно плазмы потенциала. Вдоль стенок вакуумной камеры и на её дне были размещены коллекторы в виде листов нержавеющей стали марки 12X18H10T, на которых атомы, распылённые в процессе горения разряда с поверхности вольфрамовой мишени, формировали вольфрамовые слои, которые постепенно отшелушивались и падали на дно камеры, откуда в дальнейшем собирались. Вольфрамовые чешуйки просеивались через сетку из нержавеющей стали с размером отверстий 35 × 35 мкм². Это позволило раздельно исследовать эффективность сбора зондом частиц пыли с размерами, меньшими и большими размеров ячеек сетки.

Для проведения экспериментов зонд, на который подавался потенциал, равный 5000 В, относительно пластины, на которую помещалась пыль, был закреплен неподвижно, так что его основание располагалось параллельно заземлённой пластине на расстоянии 4 мм от неё. Пластина с пылью двигалась навстречу зонду. Частицы вольфрамового порошка или отшелушенные вольфрамовые чешуйки наносились на пластину в виде полоски длиной до 50 мм, шириной до 3 мм и высотой до 2 мм. Вес полоски вольфрамового порошка и вес полоски чешуек составлял 0,05 г.

Измерения показали высокую эффективность сбора частиц пыли обоих типов электростатическим зондом как в случае стационарного положения зонда относительно пыли, так и в случае его движения относительно нее. В случае вольфрамового порошка сбор частиц с поверхности в резервуар зонда достигал 85%. При этом около 5% исходной массы порошка не отрывалось полем от пластины и оставалось на ней, еще около 4% пылевых частиц налипало на внешней поверхности зонда, 3% частиц разлетались в стороны и остальные 3% отлетали вперёд по ходу зонда и могли быть собранными при продолжении движения зонда. В случае отшелушенных вольфрамовых частиц максимальное значение сбора частиц с поверхности в резервуар зонда составило 90% (это значение практически не изменялось в случае использования как исходных чешуйчатых частиц, так и при использовании частиц, просеянных через сетку). Около 4% исходной массы отшелушенных чешуек оставались на месте дорожки, еще около 2% пылевых частиц налипало на внешней поверхности зонда, 2% частиц разлетались в стороны и остальные 2% отлетали вперёд по ходу зонда и могли быть собранных частиц налипало на внешней поверхности в резервуар зонда составило 90% (это значение практически не изменялось в случае использования как исходных чешуйчатых частиц, так и при использовании частиц, просеянных через сетку). Около 4% исходной массы отшелушенных чешуек оставались на месте дорожки, еще около 2% пылевых частиц налипало на внешней поверхности зонда, 2% частиц разлетались в стороны и остальные 2% отлетали вперёд по ходу зонда и могли быть собранными при продолжении движения зонда.

Эффективности сбора зондом как вольфрамового порошка, так и отшелушенных вольфрамовых чешуек в осушенном азоте при атмосферном давлении оказались близкими к результатам, полученным в вакууме.



Рис. 1. Кристаллические частицы вольфрамовой пыли с простыми геометрическими формами



Рис. 2. Общий вид чешуйчатых частиц



Рис. 3. Толщина отдельной чешуйчатой частицы



Рис. 4. Схема работы электростатического зонда

Литература

 Begrambekov L.B., Gordeev A. A., Grunin A.V., Evsin A.E., [et al.]. The Peculiarities of hydrogen trapping and retention in zirconium with chromium coating // Materials of VII International School-Conference of young researchers and specialists IHISM'11 (24-28 October, 2011, Zvenigorod), P. 323– 340. Научное издание

Труды 60-й Всероссийской научной конференции МФТИ

Фундаментальная и прикладная физика

20-26 ноября 2017 года

Составители: М.В. Милов, Е.Ю. Чиркина

Редакторы: В.А. Дружинина, И.А. Волкова, О.П. Котова, Н.Е. Кобзева

> Корректоры: И.А. Волкова, О.П. Котова, Н.Е. Кобзева

> > Набор и вёрстка: *М.А. Чайковский*

Подписано в печать 12.12.2017. Фомат 60 × 84 ¹/s. Усл. печ. л. 43,25. Тираж 60 экз. Заказ № 608. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)» 141707, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9 Тел. (495)408-58-22

> "Полиграфия "ПРОДВИЖЕНИЕ" 123592, г. Москва, ул. Кулакова дом 20, стр. 1Б E-mail: info@prodv.pro Тел. (495) 988-93-68



